

VŠB – Technická univerzita Ostrava
Fakulta elektrotechniky a informatiky
Katedra aplikované matematiky

**Kvadraturní formule pro efektivní numerické
řešení transportních rovnic**

**Quadrature formulas for the effective
numerical solution of transport equation**

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto diplomovou práci vypracovala samostatně.
Uvedla jsem všechny literární prameny a publikace, ze kterých jsem čerpala.

V Ostravě dne 6. 5. 2010

.....
Kateřina Janurová

Poděkování

Děkuji vedoucímu diplomové práce Ing. Pavlu Praksovi, Ph.D. za cenné rady, připomínky a metodické vedení práce. Dále bych chtěla poděkovat Ing. Oldřichu Vlachovi, Ph.D. za pomoc a trpělivost při spouštění transportního kódu a Prof. Dr. Ir. R. Robertu Beauwensovi za vlídné přijetí na Université Libre de Bruxelles.

Abstrakt

Metoda hraničních zdrojů je integrální metoda představená na konci šedesátých let dvacátého století pro řešení jednorozměrných jedno-rychlostních neutronových transportních rovnic. V současnosti se jedná o jednu z nejpřesnějších metod pro řešení transportních rovnic v po částech homogenním prostředí. Tato metoda je ovšem výpočetně náročná, protože je nutné vyhodnotit velké množství Legendrových úhlových momentů přidružené Greenovy funkce, které jsou integrálem ze součinu Chandrasekharových polynomů a složité váhové funkce, která zahrnuje různé singularity. Cílem této práce je prostudovat daný integrand, analyzovat možné singularity a implementovat vybrané kvadraturní vzorce. Výsledky řešení vybraných modelových úloh budou porovnány v závislosti na dosažené rychlosti a přesnosti.

Klíčová slova: neutronová transportní rovnice, metoda hraničních zdrojů, Gaussova kvadratura, Anti-Gaussova kvadratura

Abstract

The Boundary Sources Method (BSM) is an integral method introduced in the late 1960s for solving one-dimensional one-velocity neutron transport problems. It is probably the most accurate transport solution method available today for solving piecewise homogenous transport problems. Nevertheless the method is computationally expensive due to the numerical evaluation of a large number of Legendre's angular moments of the associated Green's function, which are integrals of product of Chandrasekhar polynomials with a complicated weight function presenting a variety of singularities. The aim of this thesis is to study the integrand and the singularities and to implement selected numerical methods for the numerical quadrature. Result of test cases, in terms of speed and numerical precision, will be presented and discussed.

Keywords: Neutron transport equation, Boundary Sources Method, Gauss Quadrature, Anti-Gauss Quadrature

Obsah

1	Úvod	5
2	Neutronová transportní rovnice.....	6
2.1	Řešení neutronové transportní rovnice s isotropním rozptylem a prostředím beze zdrojů	6
2.2	Řešení v případě úhlového toku generovaného lokalizovaným zdrojem.....	10
2.3	Greenova funkce rovnice s isotropním rozplytem	11
2.4	Řešení neutronové transportní rovnice s anisotropním rozptylem.....	11
2.5	Greenova funkce nekonečného média	15
2.6	Rozptylová jádra	16
2.6.1	Henyeey-Greensteinovo rozptylové jádro.....	16
2.6.2	Binomické rozptylové jádro	17
3	Metoda hraničních zdrojů	19
3.1	Obecný princip.....	19
3.2	Formulace metody hraničních zdrojů v rovinné geometrii	20
3.3	Integrální rovnice metody hraničních zdrojů	21
3.4	Diskrétní rovnice metody hraničních zdrojů.....	22
3.4.1	Diskrétní partikulární řešení nehomogenního problému	22
3.4.2	Diskrétní obecné řešení homogenního problému	24
3.4.3	Diskrétní řešení.....	24
3.5	Výpočet úhlových Legendrových momentů Greenovy funkce nekonečného média.....	25
3.6	Lineární systém rovnic metody hraničních zdrojů.....	26
4	Program Case.....	27
4.1	Celkový přehled	27
4.2	Struktura programu	27
4.2.1	Třídy metody hraničních zdrojů	27
4.2.2	Třídy nukleárních dat	28
4.2.3	Třídy Greenovy funkce.....	28
4.2.4	Třídy partikulárního řešení	29
4.2.5	Třídy speciálních funkcí	29

4.2.6	Pomocné třídy.....	29
4.3	Spuštění programu	31
4.3.1	Problém Cardona.....	31
4.3.2	Problém Reed	33
5	Kvadrurní formule.....	35
5.1	Analýza integrandu	35
5.1.1	Singularity v bodě $\nu = 0$	35
5.1.2	Singularita v bodě $\nu = +1$	36
5.2	Ortogonalní polynomy a Jacobiho matice.....	36
5.2.1	Ortogonalní polynomy.....	36
5.2.2	Tříčlenný rekurentní vztah.....	38
5.2.3	Jacobiho matice	39
5.2.4	Příklady ortogonálních polynomů	40
5.3	Gaussova kvadratura	47
5.3.1	Gauss-Chandrasekharova kvadratura	47
5.4	Odhad chyby Gaussovy kvadratury	49
6	Numerické experimenty	50
6.1	Porovnání Gaussovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla.....	50
6.2	Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury.....	53
6.3	Složená Gaussova kvadratura	56
7	Závěr.....	63
	Použité zdroje	64
	Seznam příloh.....	66

Seznam obrázků

Obrázek 2.1 - Henyey - Greenstaeinovo rozptylové jádro s různými hodnotami parametru g	17
Obrázek 2.2 - Binomické rozptylové jádro s různými hodnotami parametru N	18
Obrázek 3.1 - Umístění buněk v rovinné geometrii, inspirováno [1].....	20
Obrázek 4.1 - Struktura programu Case [10]	30
Obrázek 4.2 - Rozptylová funkce problému Cardona.....	32
Obrázek 4.3 - Prostorový tok neutronů problému Cardona s isotropním rozptylem	32
Obrázek 4.4 - Prostorový tok neutronů problému Cardona s anisotropním rozptylem.....	33
Obrázek 4.5 - Prostorový tok neutronů problému Reed s isotropním rozptylem.....	34
Obrázek 5.1 - Gegenbauerovy polynomy.....	40
Obrázek 5.2 - Hermitovy polynomy	41
Obrázek 5.3 - Jacobiho polynomy s koeficientem $\alpha = 2, \beta = 1$	42
Obrázek 5.4 - Obecné Laguerrovy polynomy s koeficientem $\alpha = 1$	43
Obrázek 5.5 - Legendrovy polynomy	44
Obrázek 5.6 - Čebyševovy polynomy 1. druhu.....	45
Obrázek 5.7 - Čebyševovy polynomy 2. druhu.....	46
Obrázek 6.1 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla i. .	51
Obrázek 6.2 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla ii.	51
Obrázek 6.3 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iii.	52
Obrázek 6.4 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iv.	53
Obrázek 6.5 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury i.....	54
Obrázek 6.6 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury ii.....	55
Obrázek 6.7 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury iii.....	55
Obrázek 6.8 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury iv.....	56
Obrázek 6.9 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury i.	57
Obrázek 6.10 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury ii.	58
Obrázek 6.11 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iii.	59
Obrázek 6.12 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iv.	59
Obrázek 6.13 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury v.	60
Obrázek 6.14 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vi.	61
Obrázek 6.15 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vii.	61
Obrázek 6.16 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury viii.	62

Seznam tabulek

Tabulka 4.1 - Parametry problému Cardona	31
Tabulka 4.2 - Parametry problému Reed	33
Tabulka 5.1 - Klasické váhové funkce $d\lambda(x) = w(x)dx$	37
Tabulka 5.2 - Klasické diskrétní míry $d\lambda(x) = \sum_{k=0}^M w_k \delta(x - x_k) dx$	38
Tabulka 6.1 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla i.....	50
Tabulka 6.2 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla ii.....	51
Tabulka 6.3 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iii.....	52
Tabulka 6.4 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iv.....	52
Tabulka 6.5 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury i.	54
Tabulka 6.6 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury ii.	54
Tabulka 6.7 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury iii.	55
Tabulka 6.8 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury pomocí iv.	56
Tabulka 6.9 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury i.....	57
Tabulka 6.10 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury ii.....	58
Tabulka 6.11 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iii.....	58
Tabulka 6.12 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iv.....	59
Tabulka 6.13 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury v.....	60
Tabulka 6.14 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vi.....	60
Tabulka 6.15 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vii.....	61
Tabulka 6.16 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury viii.....	62

1 Úvod

Jedním z nejdůležitějších problémů, které se týkají jaderné energie, je nakládání se vzniklými odpady. V současnosti je nejpoužívanějším východiskem geologické uskladnění vyhořelého materiálu. Takový postup ovšem nemůže být trvalým řešením, a proto se pracuje na jeho omezení. Toho lze dosáhnout transmutací minoritních aktinoidů (Neptunium, Americium, Curium,...) a dlouhou životností štěpných produktů. MYRRHA [9] je zařízení, které dovoluje tyto jevy studovat. Jedná se o urychlovací řídicí systém ve vývoji v Belgickém nukleárním výzkumném centru SCK•CEN (více v příloze [1]). Ten pro svá studia potřebuje časově závislý transportní kód, který dokáže zacházet s charakteristikami systému – podkritickým a externím zdrojem.

Tato práce navazuje na práce [1] a [10] a studuje možnosti dalšího vylepšení stávajícího transportního kódu. V následující kapitole začneme s řešením neutronové transportní rovnice, která popisuje transport neutronů v jaderných reaktorech. Pomocí teorie vlastního rozkladu, představenou Mikou a Casem, lze odvodit řešení transportní rovnice s isotropním i anisotropním rozptylem. Jsou zde také uvedeny nejpoužívanější rozptylová jádra.

Třetí kapitola se zabývá metodou hraničních zdrojů. Je to základní metoda, která využívá přesné znalosti transportního jádra. To danou metodu omezuje na jednoduché geometrie, jako jsou rovinná, sférická a cylindrická geometrie. Podstatou metody je vyjádření řešení po částech homogenního konečného problému jako konvoluci transportního jádra s hraničními zdroji.

Čtvrtá kapitola podává celkový přehled současného transportního kódu Case. Popisuje hlavní části kódu, jejich funkce a vzájemné vztahy. Jsou zde prezentovány výsledky modelových úloh.

Metoda hraničních zdrojů řeší úlohy neutronových transportních rovnic s vysokou přesností, je však výpočetně velmi náročná. V páté kapitole bude provedena analýza časově nejnáročnější části výpočtu, představena kvadrurní formule Gaussova typu a nakonec odhadnuta chyba numerického výpočtu.

V poslední kapitole jsou uvedeny výsledky provedených numerických experimentů.

2 Neutronová transportní rovnice

Neutronová transportní rovnice popisuje transport neutronů v jaderných reaktorech, stejně jako transport fotonů ve hvězdných atmosférách. V této kapitole se budeme zabývat řešením základní homogenní jedno-rychlostní neutronové transportní rovnice s isotropním i anisotropním rozptylem v rovinné geometrii. Při odvozování vyjdeme z klasické Boltzmannovy rovnice, kterou zjednodušíme tím, že diskretizujeme neutronové energetické spektrum do skupin s různou energií. K nalezení řešení bude použita teorie vlastního rozkladu, která byla poprvé představena Mikou a Casem.

Vlastní rozklad spočívá v souboru vlastních čísel a jejich příslušných vlastních funkcí, doplněných spojitým spektrem $[-1,1]$ s odpovídajícími vlastními distribucemi. Množství vlastních čísel je závislé na řešeném problému. Vlastní rozklad je úplný a ortogonální a z toho vyplývá, že každé řešení homogenní jedno-rychlostní Boltzmannovy neutronové transportní rovnice lze vyjádřit jednoznačně jako lineární kombinaci vlastních funkcí a vlastních distribucí. Nakonec bude pomocí vlastního rozkladu sestavena Greenova funkce pro nekonečné médium.

2.1 Řešení neutronové transportní rovnice s isotropním rozptylem a prostředím beze zdrojů

V této sekci převzeme analýzu provedenou v [1], která nás dovede k řešení neutronové transportní rovnice s isotropním rozptylem v prostředí beze zdrojů.

Boltzmannova neutronová transportní rovnice je dána vztahem

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} + v\vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = \\ = -v\Sigma_t(\vec{r}, v)n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) + \int_{v', \vec{\Omega}'} v'\Sigma_s(\vec{r}, v', v, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)dv'd\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t). \end{aligned} \quad (2.1)$$

Rovnice (2.1) je závislá na čtyřech proměnných, a to na:

- \vec{r} - polohový vektor,
- $\vec{\Omega}$ - jednotkový vektor, který určuje směr pohybu,
- v - norma vektoru rychlosti,
- t - čas.

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

Další symboly v rovnici (2.1) mají následující význam:

- $\Sigma_s(\vec{r}, v)$ - makroskopický rozptylový průřez v bodě \vec{r} pro neutrony s rychlostí v ,
- $\Sigma_t(\vec{r}, v)$ - makroskopický celkový průřez v bodě \vec{r} pro neutrony s rychlostí v ,
- $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ - úhlová hustota neutronů, $n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) d^3\vec{r} dv d\vec{\Omega}$ pak představuje očekávaný počet neutronů v objemu $d^3\vec{r}$, s rychlostí v intervalu dv a směrem pohybu v elementu prostorového úhlu $d\vec{\Omega}$ v čase t ,
- $Q(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ - neutrony emitované za jednotkový čas v objemu $d^3\vec{r}$, s rychlostí v intervalu dv a směrem pohybu v elementu prostorového úhlu $d\vec{\Omega}$ (zdroj)
- $\Sigma_s(\vec{r}, v', v, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})$ - průřez rozptylové kolize, neutron vstupující do kolize s rychlostí $v'\vec{\Omega}'$, opustí jádro s rychlostí $v\vec{\Omega}$ v rychlostně-úhlovém elementu $dv d\vec{\Omega}$.

Dále zavedeme úhlový tok neutronů jako $\phi(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t) = v \cdot n(\vec{r}, v, \vec{\Omega}, t)$ a provedeme zjednodušení rovnice (2.1) tím, že nadále budeme provádět výpočet pro neutrony z jedné skupiny neutronového energetického spektra. Rovnice (2.1) tak nebude závislá na normě vektoru rychlosti v a můžeme psát

$$\frac{\partial \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t)}{\partial t} + \vec{\Omega} \cdot \nabla_{\vec{r}} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = -\Sigma_t(\vec{r}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) + \int_{\Omega'} \Sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}', t) d\Omega' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, t). \quad (2.2)$$

Úlohu budeme řešit v rovinné geometrii, vektor $\vec{\Omega}$, který určuje směr pohybu, můžeme vyjádřit jako $d\vec{\Omega} = \sin \theta d\theta d\varphi = d\mu d\varphi$, kde $\mu = \cos \theta$ a φ je azimutální úhel podél x . Dále budeme uvažovat časově nezávislý problém, isotropní rozptyl a prostředí beze zdrojů $Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, t) = 0$ v homogenním médiu. Za těchto předpokladů dostaneme integraci rovnice (2.2) podle azimutálního úhlu jednorozměrnou homogenní neutronovou transportní rovnici

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = \frac{c \Sigma_t}{2} \int_{-1}^{+1} \phi(x, \mu') d\mu', \quad (2.3)$$

kde $c = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ vyjadřuje počet sekundárních neutronů za kolizi.

Řešení rovnice (2.3) budeme hledat pomocí metody separace proměnných. Předpokládejme, že existuje řešení, které lze vyjádřit ve tvaru $\phi(x, \mu) = X_v(x) \cdot \phi_v(\mu)$. Jestliže tento výraz dosadíme do rovnice (2.3) dostaneme

$$\mu \frac{\partial (X_v(x) \cdot \phi_v(\mu))}{\partial x} + \Sigma_t X_v(x) \cdot \phi_v(\mu) = \frac{c \Sigma_t}{2} \int_{-1}^{+1} X_v(x) \cdot \phi_v(\mu') d\mu'. \quad (2.4)$$

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

Po několika drobných úpravách máme proměnné separované na opačných stranách rovnice

$$\frac{1}{\Sigma_t} \frac{1}{X_v(x)} \frac{dX_v(x)}{dx} = \frac{1}{\phi_v(\mu)} \left(-\frac{\phi_v(\mu)}{\mu} + \frac{c}{2\mu} \int_{-1}^{+1} \phi_v(\mu') d\mu' \right). \quad (2.5)$$

Vztah (2.5) říká, že funkce na levé straně závisí pouze na proměnné x , zatímco funkce na pravé straně závisí jen na proměnné μ . Tato rovnice musí platit pro všechna x i μ , a jestliže položíme obě strany rovny konstantě, kterou označíme $-1/\nu$, dostaneme ihned řešení prostorové části rovnice (2.5)

$$\frac{1}{\Sigma_t} \frac{1}{X_v(x)} \frac{dX_v(x)}{dx} = -\frac{1}{\nu} \Rightarrow X_v(x) = e^{-\Sigma_t x / \nu}, \quad X_v(0) = 1. \quad (2.6)$$

Pro úhlovou část rovnice (2.5) vyvstane následující úloha týkající se vlastních čísel

$$B\phi_v(\mu) \equiv \frac{\phi_v(\mu)}{\mu} - \frac{c}{2\mu} \int_{-1}^{+1} \phi_v(\mu') d\mu' = \frac{1}{\nu} \phi_v(\mu). \quad (2.7)$$

Jestliže vezmeme v úvahu podmínku normalizace

$$\int_{-1}^{+1} \phi_v(\mu') d\mu' = 1, \quad (2.8)$$

přejde předchozí vztah na

$$B\phi_v(\mu) \equiv \frac{\phi_v(\mu)}{\mu} - \frac{c}{2\mu} = \frac{1}{\nu} \phi_v(\mu). \quad (2.9)$$

Vzhledem k bodovému spektru operátoru B^1 , který manipuluje rovnicí (2.9) dostaneme

$$\phi_v(\mu) = \frac{cv}{2} \frac{1}{\nu - \mu}. \quad (2.10)$$

Z podmínky normalizace nakonec získáme charakteristickou rovnici pro úlohu vlastních čísel

$$\int_{-1}^{+1} \frac{cv}{2} \frac{1}{\nu - \mu} d\mu = 1 \Leftrightarrow \frac{cv}{2} \ln \frac{\nu+1}{\nu-1} = 1 \Rightarrow \Lambda(\nu) \equiv 1 - \frac{cv}{2} \ln \frac{\nu+1}{\nu-1} = 0. \quad (2.11)$$

¹ Bodové spektrum operátoru B je taková množina hodnot λ , že platí $(B - I\lambda)$ je singulární, tzn. $\det(B - I\lambda) = 0$. V tomto případě $\lambda = 1/\nu$, tedy ν je inverzí vlastních čísel B . Pro jednoduchost budeme v následujícím textu označovat ν jako vlastní číslo.

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

Charakteristická rovnice isotropního rozptylu má pouze dvě vlastní čísla $\nu = \pm \nu_0$, pro která platí:

- i. jsou reálná pro $c \in (0,1)$ nebo čistě imaginární pro jiné c ,
- ii. $|\nu_0| > 1$,
- iii. vyskytují se ve dvojici s opačným znaménkem,
- iv. jsou konečné.

Příslušné vlastní funkce jsou

$$\phi_{0+}(\mu) = \frac{c\nu_0}{2} \frac{1}{\nu_0 - \mu} \quad \text{a} \quad \phi_{0-}(\mu) = \frac{c\nu_0}{2} \frac{1}{\nu_0 + \mu}. \quad (2.12)$$

Vlastnosti vlastních funkcí:

- i. Vlastní funkce jsou ortogonální s váhou μ

$$\int_{-1}^{+1} \mu \phi_{\nu}(\mu) \phi_{\nu'}(\mu) d\mu = 0, \quad \text{pro} \quad \nu \neq \nu'.$$

- ii. Norma vlastní funkce

$$M_{0\pm} = \pm \frac{c\nu_0}{2} \left(\frac{c\nu_0^2}{\nu_0^2 - 1} - 1 \right).$$

Pomocí superpozice potom můžeme psát obecné řešení rovnice (2.3) jako

$$\phi(x, \mu) = A \frac{c\nu_0}{2} \frac{e^{-\Sigma_t x / \nu}}{\nu_0 - \mu} + B \frac{c\nu_0}{2} \frac{e^{\Sigma_t x / \nu}}{\nu_0 + \mu}, \quad (2.13)$$

kde A a B jsou konstanty. Bohužel toto řešení neutronové transportní rovnice nedokáže vyhovět libovolným okrajovým podmínkám jako $\phi(a, \mu) = 0$ pro $\mu > 0$.

Aby se problém zevšeobecnil, navrhl Case řešit rovnici (2.9) nejen pro běžné funkce, ale obecně i pro distribuce. V tomto případě přejde rovnice (2.10) v

$$\phi_{\nu}(\mu) = \frac{c\nu}{2} P \frac{1}{\nu - \mu} + \lambda(\nu) \delta(\nu - \mu), \quad (2.14)$$

kde P označuje Cauchyho hlavní hodnotu a $\lambda(\nu)$ libovolnou funkci.

Jestliže $\nu \notin [-1, 1]$, na hodnotě $\lambda(\nu)$ nezáleží a obdržíme výše uvedené výsledky. Jestliže $\nu \in [-1, 1]$, dostaneme z normalizační podmínky

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} \phi_{\nu}(\mu) d\mu = 1 &\Leftrightarrow \frac{c\nu}{2} P \int_{-1}^{+1} \frac{1}{\nu - \mu} d\mu + \int_{-1}^{+1} \lambda(\nu) \delta(\nu - \mu) d\mu = 1 \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{c\nu}{2} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-1}^{\nu-\varepsilon} \frac{1}{\nu - \mu} d\mu + \int_{\nu+\varepsilon}^{+1} \frac{1}{\nu - \mu} d\mu \right] + \lambda(\nu) = 1 \Rightarrow \lambda(\nu) = 1 - \frac{c\nu}{2} \ln \frac{1+\nu}{1-\nu}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Tyto distribuce nejsou vlastními funkcemi operátoru B , protože nenáleží do Hilbertova prostoru, kde je B definováno. Můžeme je ale aproximovat pomocí funkcí $\phi_{\varepsilon, \nu}(\mu)$ v definičním oboru B .

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

Funkce $\phi_{\varepsilon, \nu}(\mu)$ jsou přidružené spojitému spektru operátoru B^2 a ukazují, že inverze spojitěho spektra $[-1, 1]$ je spojitě spektrum operátoru B .

Distribuce $\phi_\nu(\mu)$ jsou ortogonální na intervalu $[-1, 1]$ a normalizační faktor je pro $\nu \in [-1, 1]$

$$M(\nu) = \nu \left[\lambda^2(\nu) + \left(\frac{c\pi\nu}{2} \right)^2 \right]. \quad (2.16)$$

Pomocí superpozice dostaneme obecné řešení neutronové transportní rovnice:

$$\phi(x, \mu) = a_{0-} \frac{c\nu_0}{2} \frac{e^{\Sigma_t x / \nu_0}}{\nu_0 + \mu} + a_{0+} \frac{c\nu_0}{2} \frac{e^{-\Sigma_t x / \nu_0}}{\nu_0 - \mu} + \int_{-1}^{+1} A(\nu) \phi_\nu(\mu) e^{-\Sigma_t x / \nu} d\nu. \quad (2.17)$$

2.2 Řešení v případě úhlového toku generovaného lokalizovaným zdrojem

Jestliže uvážíme působení lokalizovaného neutronového zdroje umístěného v $x_0 = 0$, vyzařujícího ve směru $\mu = \mu_0$ a dosadíme ho do rovnice (2.3), dostaneme

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = \frac{c\Sigma_t}{2} \int_{-1}^{+1} \phi(x, \mu') d\mu' + \delta(x) \delta(\mu - \mu_0). \quad (2.18)$$

Pokud vezmeme v úvahu nulový tok v nekonečnu a integrujeme rovnici (2.18) v malém intervalu kolem 0, dostaneme

$$\phi(0^-, \mu) - \phi(0^+, \mu) = \frac{1}{\mu} \delta(\mu - \mu_0). \quad (2.19)$$

Protože se teď v oblasti $x > 0$ nenachází žádný zdroj, můžeme výsledek, který byl získán výše, použít a vyjádřit tok jako lineární kombinaci základních řešení

$$\phi(x, \mu) = a_{0+} \phi_{0+}(\mu) e^{-\Sigma_t x / \nu_0} - \int_0^{+1} A(\nu) \phi_\nu(\mu) e^{-\Sigma_t x / \nu} d\nu \quad \text{pro } x > 0. \quad (2.20)$$

Obdobně můžeme psát (pro usnadnění se znaménkem mínus)

$$\phi(x, \mu) = -a_{0-} \phi_{0-}(\mu) e^{\Sigma_t x / \nu_0} - \int_{-1}^0 A(\nu) \phi_\nu(\mu) e^{-\Sigma_t x / \nu} d\nu \quad \text{pro } x < 0. \quad (2.21)$$

² Spojité spektrum operátoru B je takový soubor hodnot, že pro všechny $\varepsilon > 0$ platí $\|(B - I\varepsilon)\phi_{\varepsilon, \nu}(\mu)\| < \varepsilon$.

Nyní můžeme rovnici (2.19) vyjádřit jako

$$a_{0+}\phi_{0+}(\mu)e^{-\Sigma_t x/v_0} + a_{0-}\phi_{0-}(\mu)e^{\Sigma_t x/v_0} + \int_{-1}^{+1} A(v)\phi_v(\mu)e^{-\Sigma_t x/v} dv = \frac{1}{\mu}\delta(\mu - \mu_0). \quad (2.22)$$

Koeficienty expanze jsou vypočítány pomocí ortogonálních vlastností vlastních funkcí

$$a_{0\pm} = \frac{1}{M_{0\pm}} \int_{-1}^{+1} \phi_{0\pm}(\mu) \frac{\delta(\mu - \mu_0)}{\mu} \mu d\mu = \frac{\phi_{0\pm}(\mu_0)}{M_{0\pm}} \quad a \quad A(v) = \frac{\phi_v(\mu_0)}{M(v)}. \quad (2.23)$$

2.3 Greenova funkce rovnice s isotropním rozplytem

Jestliže nyní dosadíme výrazy (2.23) do rovnic (2.20) a (2.21), nalezneme Greenovu funkci

$$\phi(x, \mu | \mu_0) = \frac{\phi_{0+}(\mu)\phi_{0+}(\mu_0)}{M_{0+}} e^{-\Sigma_t x/v_0} - \int_0^{+1} \frac{\phi_v(\mu)\phi_v(\mu_0)}{M_v} e^{-\Sigma_t x/v} dv \quad \text{pro } x > 0, \quad (2.24)$$

$$\phi(x, \mu | \mu_0) = -\frac{\phi_{0-}(\mu)\phi_{0-}(\mu_0)}{M_{0-}} e^{\Sigma_t x/v_0} - \int_{-1}^0 \frac{\phi_v(\mu)\phi_v(\mu_0)}{M_v} e^{-\Sigma_t x/v} dv \quad \text{pro } x < 0. \quad (2.25)$$

Pro větší obecnost můžeme neutronový plošný zdroj umístit do bodu $x = x_0$, zdroj tak musíme napsat ve tvaru $\delta(x - x_0)\delta(\mu - \mu_0)$ a odpovídající Greenova funkce bude

$$G(x, \mu | x_0, \mu_0) = \frac{\phi_{0+}(\mu)\phi_{0+}(\mu_0)}{M_{0+}} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v_0} + \int_0^{+1} \frac{\phi_v(\mu)\phi_v(\mu_0)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \quad \text{pro } x > x_0, \quad (2.26)$$

$$G(x, \mu | x_0, \mu_0) = \frac{\phi_{0-}(\mu)\phi_{0-}(\mu_0)}{M_{0-}} e^{\Sigma_t(x-x_0)/v_0} - \int_{-1}^0 \frac{\phi_v(\mu)\phi_v(\mu_0)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \quad \text{pro } x < x_0. \quad (2.27)$$

2.4 Řešení neutronové transportní rovnice s anisotropním rozptylem

V této sekci odvodíme řešení homogenní jedno-rychlostní neutronové transportní rovnice v rovinné geometrii. Budeme předpokládat, že rozptylové jádro můžeme vyjádřit jako konečnou řadu Legendrových polynomů, což je klasický předpoklad, který je respektován všemi moderními výpočetními kódy.

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

Homogenní jedno-rychlostní Boltzmannova neutronová transportní rovnice s anisotropním rozptylem je dána vztahem

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = c \Sigma_t \int_{4\pi} F(\Omega' \cdot \Omega) \phi(x, \Omega') d\Omega', \quad (2.28)$$

kde $F(\Omega' \cdot \Omega)$ označuje rozptylovou funkci (rozptylové jádro), které vyjadřuje pravděpodobnost, že neutron vstupující do kolize ve směru Ω' , změní po kolizi svůj směr na Ω .

Protože předpokládáme, že rozptylové jádro můžeme vyjádřit jako konečnou řadu Legendrových polynomů, můžeme $F(\Omega' \cdot \Omega)$ přepsat jako

$$F(\Omega' \cdot \Omega) \approx f(\Omega' \cdot \Omega) = \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} f_l P_l(\Omega' \cdot \Omega), \quad (2.29)$$

kde N označuje řád rozvoje, $P_l(\Omega' \cdot \Omega)$ označuje Legendrovy polynomy řádu l a f_l Legendrovy anisotropní koeficienty. Rozptylové jádro se obvykle normalizuje, což se zrealizuje podmínkou $f_0 \equiv 1$. Jestliže dosadíme Legendrův rozvoj rozptylového jádra (2.29) do transportní rovnice (2.28), dostaneme

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = c \Sigma_t \sum_{l=0}^N \frac{2l+1}{4\pi} f_l \int_{4\pi} \phi(x, \Omega') P_l(\Omega' \cdot \Omega) d\Omega'. \quad (2.30)$$

Použitím adičního teorému pro sférické harmonické funkce a dalším zjednodušením získáme

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = \frac{c \Sigma_t}{2} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} \phi(x, \mu') P_l(\mu') d\mu'. \quad (2.31)$$

Jestliže budeme postupovat obdobným způsobem jako v sekci 2.1, použijeme metodu separace proměnných a vyjádříme úhlový tok ve tvaru $\phi(x, \mu) = X_v(x) \cdot \phi_v(\mu)$, zjistíme, že řešení prostorové části rovnice zůstává stejné. Do úhlové části rovnice však musíme zahrnout i členy Legendrova rozvoje. Namísto rovnice (2.10) dostaneme

$$\phi_v(\mu) = \frac{cv}{2} \frac{1}{v - \mu} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} \phi_v(\mu') P_l(\mu') d\mu'. \quad (2.32)$$

Nakonec pro obecné řešení rozšíříme rovnici (2.32) na

$$\phi_v(\mu) = \frac{cv}{2} P \frac{1}{v - \mu} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} \phi_v(\mu') P_l(\mu') d\mu' + \lambda(v) \delta(v - \mu). \quad (2.33)$$

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

V rovnici (2.33) se přirozeně vyskytují transportní polynomy, které jsou definovány jako Legendrovy momenty $\phi_v(\mu)$

$$g_l(v) = \int_{-1}^{+1} \phi_v(\mu) P_l(\mu) d\mu. \quad (2.34)$$

Tyto polynomy jsou dány následujícím rekurentním vztahem

$$v(1 - cf_l)g_l(v) - \frac{l+1}{2l+1}g_{l+1}(v) - \frac{l}{2l+1}g_{l-1}(v) = 0. \quad (2.35)$$

Protože jsou všechny polynomy $g_l(v)$ úměrné $g_0(v)$, je vhodné $g_l(v)$ normalizovat podmínkou $g_0(v) \equiv 1$, $g_1(v) = (1-c)v$. Dosazením transportních polynomů do rovnice (2.33) získáme obecné řešení pro $\phi_v(\mu)$

$$\phi_v(\mu) = \frac{cv}{2} P \frac{1}{v-\mu} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v) P_l(\mu) + \lambda(v) \delta(v-\mu). \quad (2.36)$$

Jestliže do rovnice (2.36) pro anisotropní rozptyl dosadíme za řád rozvoje $N=0$, dostaneme rovnici (2.14) pro isotropní rozptyl. Pro $v \notin [-1,1]$ rovnice (2.36) přejde v

$$\phi_v(\mu) = \frac{cv}{2} \frac{1}{v-\mu} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v) P_l(\mu). \quad (2.37)$$

Z podmínky normalizace (2.8) získáme charakteristickou rovnici pro bodové spektrum

$$\Lambda(v) \equiv 1 - \frac{cv}{2} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v) \int_{-1}^{+1} \frac{P_l(\mu)}{v-\mu} d\mu = 0. \quad (2.38)$$

Integrál zde můžeme chápat ve smyslu Legendrových funkcí druhého druhu. Kořeny rovnice (2.38) jsou námi hledaná diskrétní vlastní čísla, která označíme v_j .

Jestliže jsou splněny následující podmínky,

1. $\sum_{l=0}^{\infty} l^2 |f_l| < \infty$, což je konvergenční kritérium na Legendrovy (rozptylové) koeficienty. Jestliže tyto jsou odvozeny z rozptylového jádra $F(\mu)$, které je spojitá funkce pro $\mu \in [-1,1]$, je tato podmínka splněna.
2. $f(\mu)$ je spojitá a platí že $f(\mu) \geq 0$ pro $\mu \in [-1,1]$. Spojitost je zaručena, když je $f(\mu)$ rozšířena v konečnou řadu Legendrových polynomů. Nezápornost musí být určena, např. uživatelem zdrojového kódu při definování rozptylových koeficientů. Následkem toho platí, že $|f_l| \leq 1$ pro $l \geq 1$.
3. $(1 - cf_{2k+1}) \geq 0$, $k \geq 0$. Tato podmínka je splněna pro podkritický a kritický případ ($c \leq 1$)

Case [2] dokázal, že diskrétní vlastní čísla jsou

- i. reálná nebo čistě imaginární,
- ii. jednoduchá,

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

- iii. vyskytují se v plus-mínus párech,
- iv. jsou konečná,
- v. $|v_j| \geq 1$.

Pro podmínku $c < 1$ lze bod i. upřesnit na „jsou reálná“.

Příslušné vlastní funkce jsou

$$\phi_{v_j}(\mu) = \frac{cv_j}{2} \frac{\sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v_j) P_l(\mu)}{v_j - \mu}. \quad (2.39)$$

Z normalizační podmínky (2.8) nalezneme také vyjádření charakteristické rovnice pro distribuce

$$\lambda(v) \equiv 1 - \frac{cv}{2} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v) P_l \int_{-1}^{+1} \frac{P_l(\mu)}{v - \mu} d\mu = 0. \quad (2.40)$$

Distribuce nalezené pro homogenní neutronovou transportní rovnici s anisotropním rozptylem tvoří ortogonální systém a jakoukoliv funkci $f(\mu)$ můžeme vyjádřit jako jejich lineární kombinaci.

Norma vlastní funkce

$$M_{j\pm} = \pm \frac{c}{2} v_j^2 \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v_j) P_l(v_j) \left. \frac{\partial \Lambda(v)}{\partial v} \right|_{v=v_j} \quad (2.41)$$

a normalizační faktor

$$M(v) = v \left[(P\Lambda(v))^2 + \left(\frac{c\pi v}{2} \right)^2 \left(\sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v) P_l(v) \right)^2 \right]. \quad (2.42)$$

Obecné řešení homogenní jedno-rychlostní Boltzmannovy neutronové transportní rovnice můžeme shrnout jako

$$\phi(x, \mu) = \sum_{j=1}^M a_{j+} \phi_{+v_j}(\mu) e^{-\frac{\Sigma_t x}{v_j}} + \sum_{j=1}^M a_{j-} \phi_{-v_j}(\mu) e^{+\frac{\Sigma_t x}{v_j}} + \int_{-1}^{+1} A(v) \phi_v(\mu) e^{-\frac{\Sigma_t x}{v}} dv, \quad (2.43)$$

kde $2M$ označuje celkový počet diskretních vlastních čísel. Kladná a záporná vlastní čísla jsou zde rozdělena v jednotlivých sumách a záporný protějšek v_j je nalezen jako jeho negace. Konstanty $a_{j\pm}$ a funkce $A(v)$ jsou určeny prostřednictvím vhodných okrajových podmínek.

2.5 Greenova funkce nekonečného média

Nalezení Greenovy funkce je nutné zejména pro výpočet metody Hraničních zdrojů, kde tvoří základ výpočtu. K vyjádření Greenovy funkce pomocí vlastních čísel a vlastních distribucí použijeme výše odvozeného vlastního rozkladu, a proto je nutné určit koeficienty $a_{j\pm}$ a funkci $A(v)$. Greenovy funkce nekonečného média je definována jako řešení nehomogenní Boltzmannovy transportní rovnice

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = \frac{c \Sigma_t}{2} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} \phi(x, \mu') P_l(\mu') d\mu' + \delta(x - x_0) \delta(\mu - \mu_0). \quad (2.44)$$

Fyzikálně si můžeme rovnici (2.44) vysvětlit jako šíření neutronů z plošného zdroje o jednotkové intenzitě, umístěného v $x = x_0$ a vyzařujícího neutrony ve směru $\mu = \mu_0$. Rovnici (2.44) převedeme na homogenní rovnici nahrazením výrazu zdroje skokovou podmínkou v $x = x_0$.

Hledáme tedy řešení homogenní rovnice

$$\mu \frac{\partial \phi(x, \mu)}{\partial x} + \Sigma_t \phi(x, \mu) = \frac{c \Sigma_t}{2} \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} \phi(x, \mu') P_l(\mu') d\mu' \quad (2.45)$$

vzhledem k okrajovým podmínkám

$$\phi(0+, \mu) - \phi(0-, \mu) = \frac{1}{\mu} \delta(\mu - \mu_0) \delta(x - x_0). \quad (2.46)$$

Dále předpokládáme subkritické médium ($c < 1$), a proto víme, že pro řešení v nekonečnu platí

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} \phi(x, \mu) = 0. \quad (2.47)$$

Abychom splnili limitní podmínku (2.47), musíme rozlišit u obecného řešení (2.43) dva případy

$$\phi(x, \mu) = \sum_{j=1}^M a_{j+} \phi_{+v_j}(\mu) e^{-\frac{\Sigma_t(x-x_0)}{v_j}} + \int_0^{+1} A(v) \phi_v(\mu) e^{-\frac{\Sigma_t(x-x_0)}{v}} dv \quad \text{pro } x \geq x_0, \quad (2.48)$$

$$\phi(x, \mu) = \sum_{j=1}^M a_{j-} \phi_{-v_j}(\mu) e^{+\frac{\Sigma_t(x-x_0)}{v_j}} - \int_{-1}^0 A(v) \phi_v(\mu) e^{-\frac{\Sigma_t(x-x_0)}{v}} dv \quad \text{pro } x \leq x_0. \quad (2.49)$$

Jestliže podrobíme rovnice (2.48) a (2.49) okrajovým podmínkám v bodě $x = x_0$ dostaneme

$$\sum_{j=1}^M a_{j+} \phi_{+v_j}(\mu) + \sum_{j=1}^M a_{j-} \phi_{+v_j}(\mu) + \int_{-1}^{+1} A(v) \phi_v(\mu) = \frac{\delta(x - x_0) \delta(\mu - \mu_0)}{\mu}. \quad (2.50)$$

2 NEUTRONOVÁ TRANSPORTNÍ ROVNICE

Koeficienty $a_{j\pm}$ a funkce $A(v)$ jsou určeny pomocí ortogonálních vlastností jako

$$a_{j\pm} = \frac{1}{M_{j\pm}} \phi_{\pm v_j}(\mu_0), \quad (2.51)$$

$$A(v) = \frac{1}{M(v)} \phi_v(\mu_0), \quad (2.52)$$

kde $M_{j\pm}$ a $M(v)$ jsou dány rovnicemi (2.41) a (2.42). Jestliže dosadíme výrazy (2.51) a (2.52) do rovnic (2.48) a (2.49), dostaneme vyjádření Greenovy funkce jako

$$G(x, \mu | x_0, \mu_0) = \sum_{j=1}^M \frac{\phi_{v_j}(\mu) \phi_{v_j}(\mu_0)}{M_{j+}} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v_j} + \int_0^{+1} \frac{\phi_v(\mu) \phi_v(\mu_0)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \quad \text{pro } x \geq x_0, \quad (2.53)$$

$$G(x, \mu | x_0, \mu_0) = \sum_{j=1}^M \frac{\phi_{-v_j}(\mu) \phi_{-v_j}(\mu_0)}{M_{0-}} e^{+\Sigma_t(x-x_0)/v_j} - \int_{-1}^0 \frac{\phi_v(\mu) \phi_v(\mu_0)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \quad \text{pro } x \leq x_0. \quad (2.54)$$

2.6 Rozptylová jádra

Rozptylové jádro je funkce definovaná pro $\mu \in [-1, 1]$, která popisuje pravděpodobnostní rozdělení cosinu úhlu mezi směrem vstupu a výstupu neutronu do srážky. V současné době jsou naprogramovány dvě rozptylová jádra, a sice Henyey-Greensteinovo rozptylové jádro a binomické rozptylové jádro.

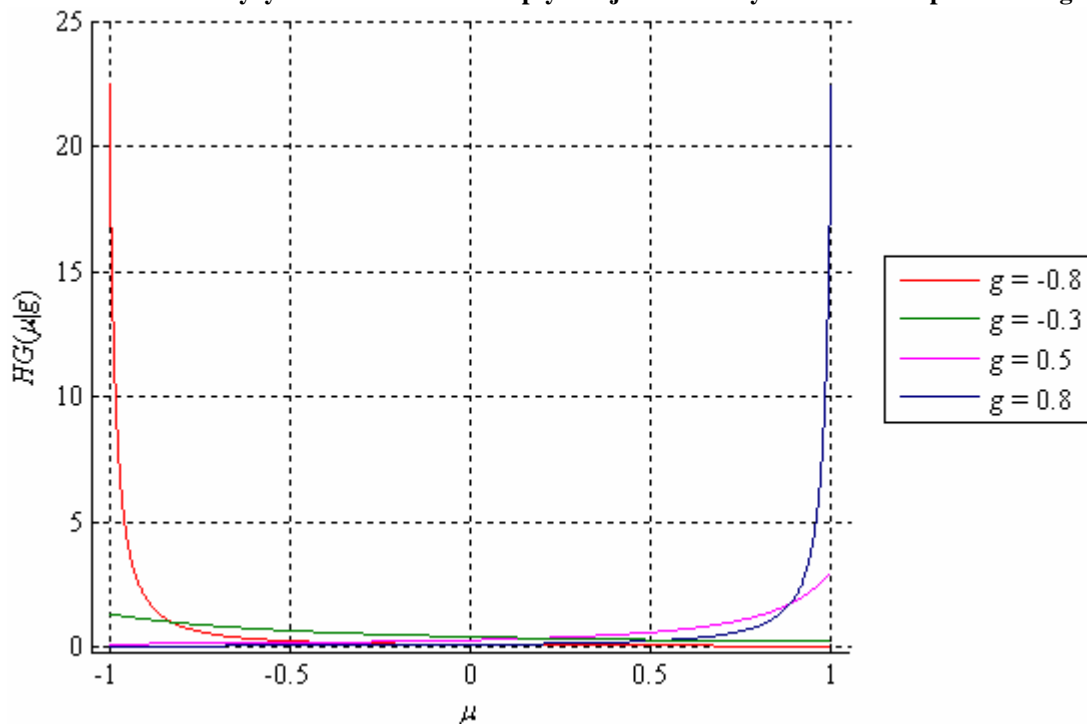
2.6.1 Henyey-Greensteinovo rozptylové jádro

Je rozptylové jádro často používané v aplikacích radiačního přenosu a je definováno jako

$$HG(\mu | g) = \frac{1 - g^2}{2(1 - 2\mu g + g^2)^{3/2}}, \quad (2.55)$$

kde g je libovolný parametr v rozpětí $g \in [-1, 1]$, který je využíván k uzpůsobení jádra experimentálním datům. V aplikacích se používají hodnoty od $g = -1$ (pro extrémně zpětný rozptyl) přes $g = 0$ (pro isotropní rozptyl) až po $g = 1$ (pro extrémně dopředný špičatý rozptyl). Na obrázku 2.1 je vyobrazeno Henyey-Greensteinovo jádro pro různé hodnoty parametru g .

Obrázek 2.1 - Henyey - Greenstaeinovo rozptylové jádro s různými hodnotami parametru g



U tohoto druhu rozptylového jádra existuje jednoduchý vztah pro jeho Legendrovy momenty

$$f_l = g^l, \quad (2.56)$$

kde f_l označuje l -tý Legendrův moment definovaný jako

$$f_l = \int_{-1}^{+1} HG(\mu | g) P_l(\mu) d\mu. \quad (2.57)$$

2.6.2 Binomické rozptylové jádro

Je dáno vztahem

$$Bi^N(\mu) = \frac{N+1}{2^N} (1+\mu)^N, \quad (2.58)$$

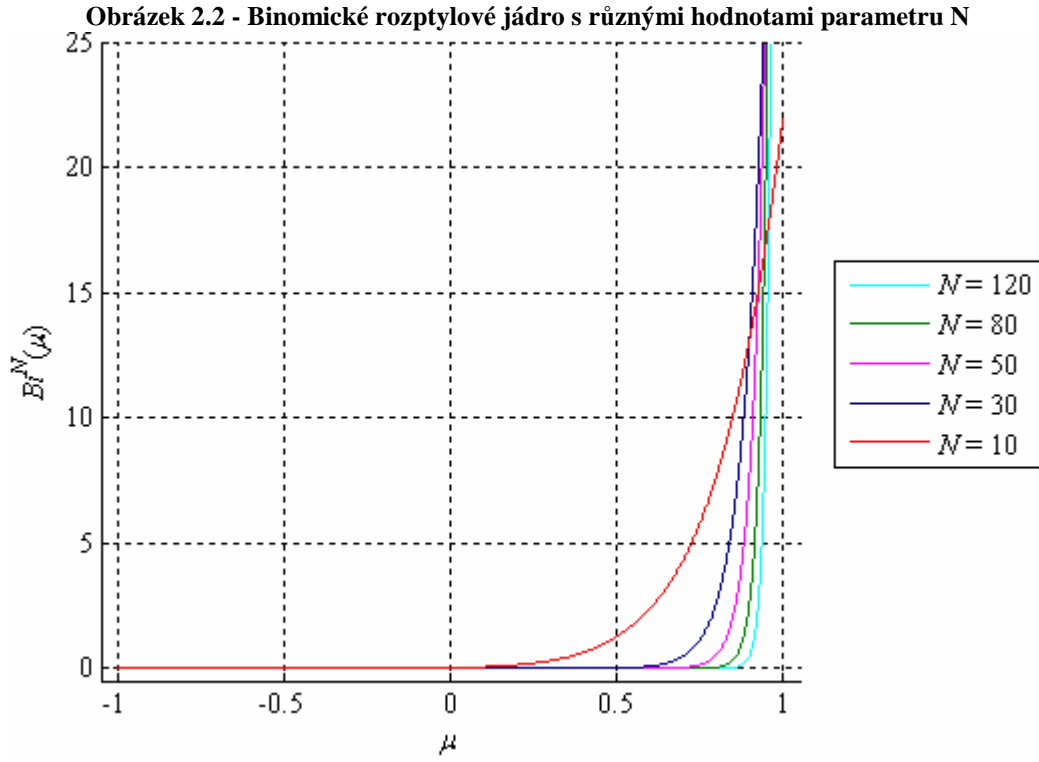
kde N je řád rozptylového předpisu. Legendrovy momenty jsou dány rekurentním vztahem:

$$f_l^N = \left(\frac{N+1-l}{N+1+l} \right) f_{l-1}^N \quad (2.59)$$

s počáteční hodnotou $f_0^N = 1$. Pro $l > N$ platí $f_l^N = 0$. Rekurenci (2.59) můžeme snadno vyřešit pomocí výrazu pro koeficient f_l :

$$f_l^N = \prod_{j=0}^{l-1} \left(\frac{N-j}{N+j+2} \right), \quad l > 0. \quad (2.60)$$

Na obrázku 2.2 je vyobrazeno Binomické jádro pro různé hodnoty parametru N .



3 Metoda hraničních zdrojů

Metoda hraničních zdrojů je základní metoda představená v 60. letech minulého století pro řešení jednorozměrných jedno-rychlostních transportních problémů, která využívá přesné znalosti transportního jádra. Tato metoda byla dále vyvíjena několika různými skupinami a zjistilo se, že je obzvláště zajímavá pro nedávno vyvinuté aplikace transportních kódů. Jedná se o jednu z nejpřesnějších metod, které jsou dnes dostupné pro řešení po částech homogenního transportního problému.

Řešení jedno-dimenzionální jedno-rychlostní neutronové transportní rovnice v konečném homogenním médiu, které může obsahovat zdroje, je vyjádřeno jako konvoluce neznámých hraničních zdrojů s přesným transportním jádrem nekonečného homogenního média. V této kapitole představíme teorii metody hraničních zdrojů, stejně jako její základní rovnice, obojí bylo uvedeno v [10] a [12]. Nakonec popíšeme diskrétní verzi metody hraničních zdrojů, sloužící k nalezení systému rovnic, který můžeme vyřešit pomocí výpočetní techniky.

3.1 Obecný princip

Hlavním důvodem pro rozvíjení metody hraničních zdrojů je získání výhody ze znalosti přesného transportního jádra, jakým je Greenova funkce homogenního nekonečného média. To však omezuje použití metody na planární, cylindrické a sférické aplikace. Tato skutečnost ovšem není na překážku v oboru uzlových transportních metod, kde je multi-dimenzionální problém přetransformován do systému sdružených jedno-dimenzionálních problémů s převodními podmínkami a výsledný jedno-dimenzionální problém je téměř vždy planární.

Základem metody hraničních zdrojů je věta o jednoznačnosti [12] pro neutronovou transportní rovnici, která tvrdí: „*Řešení neutronové transportní rovnice pro podkritický problém v daném objemu V s vnější hranicí S je jednoznačně určeno zdroji uvnitř V a vstupujícím neutronovým rozdělením na S .*“ Což můžeme chápat jako: „*Jestliže libovolně změníme vnější prostředí a vnější zdroje tak, že je zachován hraniční zdroj a vstupující rozdělení neutronů, řešení uvnitř V se nezmění.*“

Jestliže se budeme řídit tímto principem, v případě po částech homogenního média, tvořeného homogenními subregiony označenými i , každý zabírající prostor V_i s hranicí S_i s vnější normálou \mathbf{n}_i , můžeme každý tento subregion i rozšířit do nekonečna bez změny neutronového toku uvnitř V_i , za předpokladu, že zavedeme hraniční zdroj na S_i takový, který zachová vstupující rozdělení neutronů na S_i . To jednoduše znamená, že můžeme reprezentovat řešení v každém konečném homogenním subregionu i jako součet partikulárního řešení nehomogenní neutronové transportní rovnice (konvoluce Greenovy funkce nekonečného média i se zdroji ve V_i) a obecného řešení homogenní neutronové transportní rovnice (konvoluce té samé Greenovy funkce s dříve libovolně určenými zdroji na povrchu S_i). Parametr, který reprezentuje obecné řešení (hraniční zdroje na všech površích S_i) musí být zvolen tak, aby byla zachována spojitost neutronového toku na všech vnitřních rozhraních mezi subregiony a dodrženo vstupující neutronové rozdělení na vnějších hranicích.

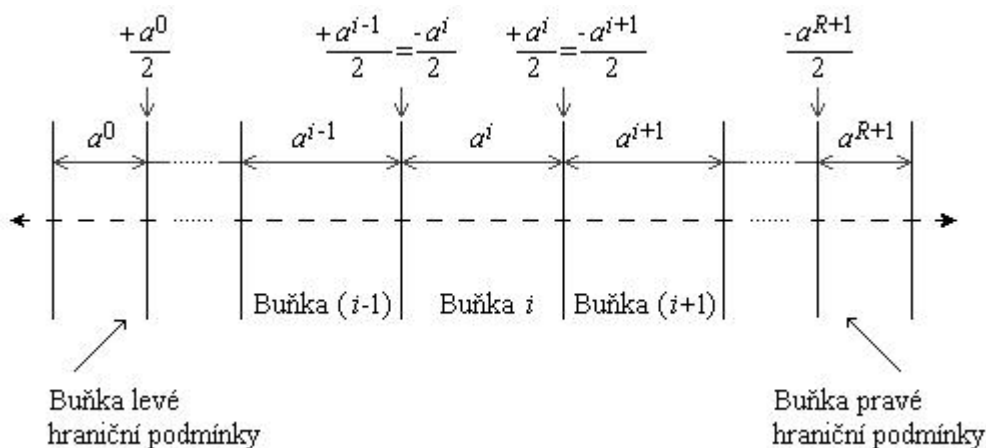
V metodě hraničních zdrojů se s neznámými – hraničními zdroji – může zacházet s libovolnou přesností. Hraniční zdroje jsou úhlově závislé a k jejich aproximaci je využíván Legendrův polynomiální rozvoj. Čím vyšší řád aproximace je použit, tím lepších výsledků lze dosáhnout.

Řešení takového problému ovšem není jednoznačné, protože můžeme k řešení jakéhokoliv přidruženého pomocného problému přidat libovolné řešení problému bez vnitřních zdrojů ve V_i . Jedním ze způsobů, jak mít problém s jednoznačným řešením, je uvažovat pouze vstupující hraniční zdroje. Druhý způsob spočívá v použití hraničních zdrojů dané parity. V [1], [10] a [12] je použita druhá metoda, která využívá hraniční zdroje konkrétně liché parity, což způsobí zjednodušení vyjádření neutronového toku blízko zdroje.

3.2 Formulace metody hraničních zdrojů v rovinné geometrii

V této sekci budeme postupovat podle [12]. Uvažujme případ po částech homogenního prostředí v rovinné geometrii a předpokládejme, že můžeme v každém homogenním subregionu – buňce – vyjádřit rozptylovou funkci ve formě konečné Legendrovy řady podle rovnice (2.29). Dále předpokládejme, že máme prostředí složené z R homogenních hraničních buněk, každou se šířkou a^i , koeficientem c^i vyjadřujícím počet sekundárních neutronů za kolizi, Σ_t^i celkový makroskopický průřez, daným nezávislým neutronovým zdrojem $Q^i(x, \mu)$, f_l^i Legendrovými anisotropními koeficienty, $l = 0, \dots, N^i$, $i = 1, \dots, R$ s nulovým vcházejícím neutronovým rozdělením na vnějších hranicích (tzn. na hranici první a poslední buňky). Abychom tento nulový tok na vnějších hranicích vyjádřili, doplníme jednoduše na každou stranu po prázdné buňce, značíme je 0 a $R+1$ s libovolnou šířkou a^0 resp. a^{R+1} , bez vnitřních zdrojů a s jedinou hranicí umístěnou v $+a^0/2$ resp. v $-a^{R+1}/2$. Struktura problému je naznačena na obrázku 3.1:

Obrázek 3.1 - Umístění buněk v rovinné geometrii, inspirováno [1]



3 METODA HRANIČNÍCH ZDOJŮ

Nadále se budeme pohybovat v relativních prostorových souřadnicích každé buňky (v každé buňce se proměnná x pohybuje v rozmezí $x \in (-a^i/2, +a^i/2)$ a můžeme psát úhlový tok v každé buňce i jako

$$\phi^i(x, \mu) = \phi_\infty^i(x, \mu) + \int_{-1}^{+1} G^i\left(x, \mu \mid -\frac{a^i}{2}, \mu_0\right) f_-^i(\mu_0) d\mu_0 + \int_{-1}^{+1} G^i\left(x, \mu \mid +\frac{a^i}{2}, \mu_0\right) f_+^i(\mu_0) d\mu_0, \quad (3.1)$$

kde $\phi_\infty^i(x, \mu)$ - označuje partikulární řešení nehomogenní rovnice pro i -tou buňku. To můžeme získat jako konvoluci Greenovy funkce nekonečného média pro moderátor se zdroji v buňce i ($x \in (-a^i/2, +a^i/2)$),

$f_-^i(\mu_0), f_+^i(\mu_0)$ - jsou neznámé hraniční zdroje umístěny v $-a^i/2$ a v $+a^i/2$,

$G^i(x, \mu \mid x_0, \mu_0)$ - určuje Greenovu funkci nekonečného média buňky i .

Partikulární řešení nehomogenní rovnice pro i -tou buňku (v relativních prostorových souřadnicích i -té buňky)

$$\phi_\infty^i(x, \mu) = \int_{-a^i/2}^{+a^i/2} dx_0 \int_{-1}^{+1} d\mu_0 G^i(x, \mu \mid x_0, \mu_0) \times Q^i(x_0, \mu_0). \quad (3.2)$$

Musíme také zdůraznit, že pro i -tou buňku pro jednoduchost píšeme výrazy jako $\phi^i(-a^i/2, \mu)$ nebo $\phi^i(+a^i/2, \mu)$, které ve skutečnosti znamenají limity pro $\varepsilon \rightarrow 0+$ u $\phi^i((-a^i/2)+\varepsilon, \mu)$ a $\phi^i((+a^i/2)-\varepsilon, \mu)$.

3.3 Integrální rovnice metody hraničních zdrojů

Pro každou hranici mezi dvěma buňkami vyžadujeme spojitost úhlového toku přes hranici, což je vyjádřeno podmínkou

$$\phi^i\left(\frac{a^i}{2}, \mu\right) = \phi^{i+1}\left(-\frac{a^{i+1}}{2}, \mu\right), \quad \text{pro } -1 \leq \mu \leq 1 \quad \text{a pro } i = 1, \dots, R-1. \quad (3.3)$$

Jak už bylo uvedeno v sekci 3.2, vyjádření nulového vstupního rozdělení neutronů na vnějších hranicích lze dosáhnout přidáním buněk pro hraniční podmínky. Integrální rovnice metody hraničních zdrojů pak platí pro $i = 0, \dots, R$.

Hraniční podmínka odrazu pro levou vnější hranici je dána vztahem

$$\phi^1\left(-\frac{a^1}{2}, \mu\right) = \phi^1\left(-\frac{a^1}{2}, -\mu\right). \quad (3.4)$$

Podobná podmínka platí pro pravou vnější hranici.

3.4 Diskrétní rovnice metody hraničních zdrojů

Abychom dostali systém rovnic, který lze vypočítat numericky, potřebujeme nalézt diskrétní reprezentaci hraničních zdrojů. Při odvozování diskrétních rovnic metody hraničních zdrojů budeme postupovat podle [1] a [12]. Jak bylo zmíněno výše, zvolili jsme lichou funkci μ definovanou pro $-1 \leq \mu \leq 1$. To nám umožňuje vyjádřit plošné zdroje ve formě konečného rozvoje Legendrových polynomů

$$f_{\pm}^i(\mu_0) \approx \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} f_{m\pm}^i P_{2m+1}(\mu_0), \quad (3.5)$$

kde M je řád metody hraničních zdrojů. Jestliže dosadíme rozvoj (3.5) do rovnice definující úhlový tok (3.1), aproximujeme rovnici úhlového toku několika rovnicemi pro úhlové momenty. Dostaneme tak $2(M+1)$ neznámých koeficientů pro jednu buňku. Abychom je určili, projektujeme rovnice metody hraničních zdrojů do podprostoru Legendrových polynomů o dimenzi $2M+1$ v μ a požadujeme, aby platilo

$$\int_{-1}^{+1} P_n(\mu) \phi^i\left(\frac{a^i}{2}, \mu\right) d\mu = \int_{-1}^{+1} P_n(\mu) \phi^{i+1}\left(-\frac{a^{i+1}}{2}, \mu\right) d\mu, \quad \text{pro } n=0,1,\dots,2M+1 \text{ a pro } i=0,\dots,R. \quad (3.6)$$

Jestliže do levé strany rovnice (3.6) dosadíme vyjádření úhlového toku (3.1), můžeme rozlišit dvě části. První odpovídá diskrétnímu partikulárnímu nehomogennímu řešení a druhá část odpovídá diskrétnímu řešení homogenního problému

$$\begin{aligned} LS = & \int_{-1}^{+1} \phi_{\infty}^i(x, \mu) P_n(\mu) d\mu + \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-1}^{+1} G^i\left(x, \mu \mid -\frac{a^i}{2}, \mu_0\right) f_{-}^i(\mu_0) P_n(\mu) d\mu_0 + \\ & + \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-1}^{+1} G^i\left(x, \mu \mid +\frac{a^i}{2}, \mu_0\right) f_{+}^i(\mu_0) P_n(\mu) d\mu_0. \end{aligned} \quad (3.7)$$

3.4.1 Diskrétní partikulární řešení nehomogenního problému

Jestliže se v buňce i nachází nezávislý zdroj $Q^i(x_0, \mu_0)$, můžeme partikulární řešení vyjádřit rovnicí (3.2), kde předpokládáme, že daný zdroj můžeme vyjádřit ve tvaru konečné Legendrovy řady řádu N_a následujícím způsobem

$$Q^i(x_0, \mu_0) = \sum_{m=0}^{N_a} \frac{2m+1}{2} q_m(x_0) P_m(\mu_0), \quad (3.8)$$

kde jsou Legendrovy úhlové momenty $q_m(x_0)$ definovány jako

$$q_m(x_0) = \int_{-1}^{+1} Q^i(x_0, \mu_0) P_m(\mu_0) d\mu_0. \quad (3.9)$$

Dosazením výrazu (3.8) do rovnice (3.2) dostaneme

$$\begin{aligned} \phi_{\infty,n}^i(x) &= \int_{-1}^{+1} \phi_{\infty}^i(x, \mu) P_n(\mu) d\mu = \\ &= \sum_{m=0}^{N_a} \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-a^i/2}^{+a^i/2} dx_0 \int_{-1}^{+1} d\mu_0 G^i(x, \mu | x_0, \mu_0) q_m(x_0) P_m(\mu_0) P_n(\mu). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dále zavedeme Legendrovy úhlové momenty Greenovy funkce nekonečného média pro buňku i

$$G_{n,m}^i(x | x_0) = \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-1}^{+1} d\mu_0 P_m(\mu_0) G(x, \mu | x_0, \mu_0) P_n(\mu) \quad (3.11)$$

a dosadíme rovnici (3.11) do rovnice (3.10)

$$\phi_{\infty,n}^i(x) = \sum_{m=0}^{N_a} \frac{2m+1}{2} \int_{-a^i/2}^{+a^i/2} dx_0 q_m(x_0) G_{n,m}^i(x | x_0). \quad (3.12)$$

Legendrovy úhlové momenty $q_m(x_0)$ mohou být rozvinuty v prostorovou Legendrovu řadu na intervale $[-a^i/2, +a^i/2]$. Legendrovy polynomy jsou převedeny do tohoto intervalu a označeny $\tilde{P}_k(x_0)$ a jsou na tomto intervalu ortogonální s váhovou funkcí $w(x) \equiv 1$. $q_m(x_0)$ tedy můžeme přepsat jako

$$q_m(x_0) = \sum_{k=0}^{N_s} \frac{2k+1}{2} q_{m,k} \tilde{P}_k(x_0), \quad (3.13)$$

kde jsou dvojité momenty $q_{m,k}$ dány výrazem

$$q_{m,k} = \int_{-a^i/2}^{+a^i/2} q_m(x_0) \tilde{P}_k(x_0) dx_0. \quad (3.14)$$

Dosazením rovnice (3.13) do rovnice (3.12) získáme

$$\phi_{\infty,n}^i(x) = \sum_{m=0}^{N_a} \frac{2m+1}{2} \int_{-a^i/2}^{+a^i/2} \sum_{k=0}^{N_s} \frac{2k+1}{2} q_{m,k} \tilde{P}_k(x_0) q_m(x_0) G_{n,m}^i(x | x_0) dx_0 \quad (3.15)$$

a pokud vyjádříme úhlový/prostorový Legendrův moment Greenovy funkce v buňce i jako

$$G_{n,m,k}^i(x) = \int_{-a^i/2}^{+a^i/2} G_{n,m}^i(x|x_0) \tilde{P}_k(x_0) dx_0 \quad (3.16)$$

a dosadíme do rovnice (3.15) dostaneme konečně diskretní partikulární řešení nehomogenního problému v buňce i jako

$$\phi_{\infty,n}^i(x) = \sum_{m=0}^{N_a} \frac{2m+1}{2} \left(\sum_{k=0}^{N_s} \frac{2k+1}{2} q_{m,k} G_{n,m,k}^i(x) \right). \quad (3.17)$$

3.4.2 Diskretní obecné řešení homogenního problému

Jestliže dosadíme rozvoj hraničních zdrojů daný výrazem (3.5) do části rovnice (3.7) odpovídající diskretnímu řešení homogenního problému, dostaneme

$$\begin{aligned} & \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-1}^{+1} G^i \left(x, \mu \middle| -\frac{a^i}{2}, \mu_0 \right) \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} f_{m-}^i P_{2m+1}(\mu_0) P_n(\mu) d\mu_0 + \\ & + \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-1}^{+1} G^i \left(x, \mu \middle| +\frac{a^i}{2}, \mu_0 \right) \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} f_{m+}^i P_{2m+1}(\mu_0) P_n(\mu) d\mu_0. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Vyjádřením úhlových Legendrových momentů Greenovy funkce v buňce i (3.11) dostaneme konečný výraz pro diskretní obecné řešení homogenního problému jako

$$\sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} \left[f_{m-}^i G_{n,2m+1}^i \left(x \middle| -\frac{a^i}{2} \right) + (-1)^{n+1} f_{m+}^i G_{n,2m+1}^i \left(x \middle| +\frac{a^i}{2} \right) \right]. \quad (3.19)$$

3.4.3 Diskretní řešení

Konečně můžeme napsat diskretní řešení použitím rovnic (3.6) a výrazu (3.19) jako

$$\begin{aligned} \phi_n^i \left(\frac{a^i}{2}, \mu \right) &= \phi_n^{i+1} \left(-\frac{a^{i+1}}{2}, \mu \right) \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} \left[f_{m-}^i G_{n,2m+1}^i \left(+\frac{a^i}{2} \middle| -\frac{a^i}{2} \right) + (-1)^{n+1} f_{m+}^i G_{n,2m+1}^i \left(+\frac{a^i}{2} \middle| +\frac{a^i}{2} \right) \right] - \\ &- \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} \left[f_{m-}^{i+1} G_{n,2m+1}^{i+1} \left(-\frac{a^{i+1}}{2} \middle| -\frac{a^i}{2} \right) + (-1)^{n+1} f_{m+}^{i+1} G_{n,2m+1}^i \left(-\frac{a^{i+1}}{2} \middle| +\frac{a^{i+1}}{2} \right) \right] = \\ &= \phi_{\infty,n}^{i+1} \left(-\frac{a^{i+1}}{2} \right) - \phi_{\infty,n}^i \left(+\frac{a^i}{2} \right). \end{aligned} \quad (3.20)$$

S použitím vlastnosti invariance vůči posuvu transportního jádra

$$G(x, \mu | x_0, \mu_0) = G(0, \mu | x_0 - x, \mu_0), \quad (3.21)$$

můžeme psát

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} \left[f_{m-}^i G_{n,2m+1}^i(0 | a^i) + (-1)^{n+1} f_{m+}^i G_{n,2m+1}^i(0 | 0) \right] - \\ & - \sum_{m=0}^M \frac{4m+3}{2} \left[f_{m-}^{i+1} G_{n,2m+1}^{i+1}(0 | 0) - (-1)^{n+1} f_{m+}^{i+1} G_{n,2m+1}^{i+1}(0 | a^{i+1}) \right] = \\ & = \phi_{\infty,n}^{i+1} \left(-\frac{a^{i+1}}{2} \right) - \phi_{\infty,n}^i \left(+\frac{a^i}{2} \right) \quad \text{pro } n = 0, 1, \dots, 2M+1. \end{aligned} \quad (3.22)$$

3.5 Výpočet úhlových Legendrových momentů Greenovy funkce nekonečného média

Úhlové Legendrové momenty Greenovy funkce nekonečného média jsou určeny vztahem

$$G_{n,m}(x | x_0) = \int_{-1}^{+1} d\mu \int_{-1}^{+1} d\mu_0 P_m(\mu_0) G(x, \mu | x_0, \mu_0) P_n(\mu). \quad (3.23)$$

Pokud vztah (3.23) dosadíme do rovnic popisujících Greenovu funkci nekonečného média (2.53) a (2.54) a budeme zároveň pamatovat na definici transportních polynomů, danou výrazem (2.34) dospějeme k vyjádření úhlových momentů Greenovy funkce nekonečného média

$$G_{n,m}(x | x_0) = \sum_{j=1}^M \frac{g_n(v_j) g_m(v_j)}{M_{j+}} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v_j} + \int_0^{+1} \frac{g_n(v) g_m(v)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \quad \text{pro } x \geq x_0, \quad (3.24)$$

$$G_{n,m}(x | x_0) = \sum_{j=1}^M \frac{g_n(-v_j) g_m(-v_j)}{M_{j+}} e^{+\Sigma_t(x-x_0)/v_j} - \int_{-1}^0 \frac{g_n(v) g_m(v)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \quad \text{pro } x \leq x_0, \quad (3.25)$$

které obsahuje diskrétní část související s vlastními čísly úhlového transportního operátoru B (definovaného v sekci 2.1) a spojitou část související se spojitým spektrem. Výpočet vlastních čísel je řešen pomocí numerických technik. K výpočtu spojitých částí úhlových momentů je potřeba numerická kvadratura.

3.6 Lineární systém rovnic metody hraničních zdrojů

Všechny předchozí rovnice vedou k lineárnímu systému rovnic řádu $2(M+1) \times 2(M+1)$

$$Af = b, \quad (3.26)$$

kde A - je matice metody hraničních zdrojů vytvořená z Legendrových úhlových momentů Greenovy funkce, je blokově-diagonální,
 f - je vektor neznámých hraničních zdrojů,
 b - je vektor Legendrových momentů partikulárního řešení.

K výpočtu soustavy (3.26) je použit LU – rozklad, který není ve výpočetním kódu přímo implementován, místo toho je volána LAPACK rutina DGEV_F77.

4 Program Case

V této kapitole objasníme celkový přehled programu Case, popíšeme jeho nejdůležitější části a vztahy mezi nimi. Program Case je rozdělen do šesti odlišných částí [10]: třídy metody hraničních zdrojů, třídy spojené s nukleárními daty, třídy spojené s Greenovou funkcí, třídy partikulárního řešení, třídy speciálních funkcí a třídy pomocných funkcí. U každé z těchto skupin popíšeme její hlavní komponenty a funkce. Nakonec budou prezentovány výsledky, kterých bylo dosaženo při spuštění programu.

4.1 Celkový přehled

Program Case je psán v programovacím jazyce C++ a je v něm značně využíván objektově-orientovaný přístup. Vznikal po mnoho let a má, mimo hlavního tvůrce Gerta Van den Eynde [10], několik dalších tvůrců. První část, která není implementována Gertem Van den Eynde je balík C++ lineární algebry LinAl [5], který zajišťuje výpočet maticových a vektorových operací a rozhraní ke knihovně LAPACK [6]. Druhá část je balík numerických kvadratur QUADPACK. Dále zdrojový kód obsahuje implementaci Gauss-Chandrasekharovy kvadratury, která byla vytvořena Álvarem Garces Alonsem [1]. Celkově má program přes více než 10 000 řádků a 50 tříd.

4.2 Struktura programu

Detailní strukturu programu lze vystihnout z obrázku 4.1, který byl vybrán z [10] a přizpůsoben.

4.2.1 Třídy metody hraničních zdrojů

Třídy zahrnuté v této skupině slouží k definování jedno-dimensionálního problému, který chceme vyřešit. Skupina je tvořena třídami Cell (buňka), Slab (tabulka) a BoundaryCondition (hraniční podmínky).

Třída Cell vytváří jednotlivé buňky, oblasti v prostoru z určitého materiálu, a to na základě uživatelem definovaných nukleárních dat (NucData objekt). Je zde vytvořena Greenova funkce nekonečného média a přidružena k dané buňce. Tato třída obsahuje různé vyhodnocovací rutiny jako AngularFlux (úhlový tok), ScalarFlux (prostorový tok) a AverageFlux (průměrný tok), které po vypočítání extrahují z buňky požadované informace.

Třída Slab definuje oblast v prostoru, kde bude daný problém řešen. Tabulka je utvářena postupným přidáváním sousedních buněk a jakmile je sestavena, vytvoří se, společně s pravou stranou problému, matice metody hraničních zdrojů. Jak již bylo zmíněno v sekci 3.6, tato lineární soustava je vyřešena pomocí rutiny DGESV_F77 balíku LAPACK, která provede LU rozklad. Po vyřešení se jednotlivým buňkám navrátí příslušné koeficienty hraničních zdrojů.

Třída `BoundaryCondition` definuje hraniční podmínky na obou koncích tabulky (např. vakuum nebo odraz). To se děje přidáním dvou buněk (na každý konec jedna) a program s nimi nadále počítá, jako s normálními buňkami.

4.2.2 Třídy nukleárních dat

Nukleární data, která definují materiál jsou: makroskopický celkový průřez Σ_t , počet sekundárních neutronů za kolizi c a rozptylové jádro.

Rodičovská třída `ScatterKernel` (rozptylové jádro) má v současnosti dvě dceřiné třídy, a sice Henyey-Greensteinovo rozptylové jádro a binomické rozptylové jádro. Vektor rozptylových koeficientů f_l je získán z Legendrova rozvoje příslušného rozptylového jádra o řádu N . Tyto třídy mohou být snadno doplněny o další dceřiné třídy pro různá rozptylová jádra.

4.2.3 Třídy Greenovy funkce

Tyto třídy tvoří základ celého programu, počítají Legendrovy úhlové momenty Greenovy funkce nekonečného média stejně jako prostorové momenty. V této skupině jsou obsaženy třídy `CharPoly`, `CharEquation`, `Root`, `ExpAlpha` a konečně třída `Green`.

Třída `CharPoly` obsahuje rutiny na zacházení s charakteristickým polynomem. Sestaví polynom

$$P(v) = \sum_{l=0}^N (2l+1) f_l g_l(v) P_l(v)$$

a nalezne počet kořenů polynomu, který udává počet diskrétních vlastních čísel charakteristické rovnice (pro podkritický případ $c < 1$) [10]. Toto číslo nám pak dává podmínku k ukončení iteračního procesu, který hledá všechna vlastní čísla charakteristické rovnice. Největší kořen $P(v)$ taktéž omezuje největší vlastní číslo charakteristické rovnice a je také využíván v iterační rutině. Jestliže pro řád anisotropie platí $N < 50$, je charakteristický polynom sestaven pomocí Chebyshevovy aproximace [10], [15]. Pro $N \geq 50$ se polynom nekonstruuje, ale jeho kořeny jsou určeny pomocí Newton-Raphsonova algoritmu [10].

Třída `CharEquation` obsahuje vyhodnocovací rutiny pro charakteristickou rovnici (2.38) jako jsou závorkovaní procedura a `NLESolver`, který využívá Van Wijngaarden-Dekker-Brentovu metodu [13] a bisekci.

Jakmile jsou nalezeny všechny kořeny charakteristické rovnice, je vytvořen objekt třídy `NormalRoot` nebo `DeltaRoot` – dceřiných tříd rodičovské třídy `Root` – a přidán na seznam obsahující všechny kořeny. Pro každý kořen jsou také vypočítány normalizační integrály.

Třída `ExpAlpha` se využívá k výpočtu integrálu

$$\int_{-a/2}^{+a/2} \tilde{P}_k(x_0) e^{-\Sigma_t |x-x_0|/v} dx_0.$$

Třída Green vypočítá úhlové momenty $G_{n,m}(x|x_0)$ a úhlové-prostorové momenty $G_{n,m,k}(x)$ Greenovy funkce za pomoci výsledků třídy CharEquation, uložených v třídě Root a numerické kvadratury, která vypočte integrály vyskytující se v rovnicích (2.53) a (2.54).

4.2.4 Třídy partikulárního řešení

V této skupině jsou umístěny třídy, které vypočítají partikulární řešení nehomogenní transportní rovnice (3.2). Externí zdroj $Q(x,\mu)$ je rozvinut ve dvojnásobnou Legendrovu řadu (jeden rozvoj pro úhlové souřadnice a druhý rozvoj pro prostorové souřadnice) a je definován ve třídě Source (zdroj). Tato třída je abstraktní základní třída buď pro separabilní zdroj (úhlové a prostorové souřadnice jsou navzájem nezávislé) nebo pro neseparabilní zdroj. V prvním případě můžou být Legendrovy koeficienty uloženy ve dvou vektorech o velikostech N_a a N_s , které odpovídají řádům úhlové a prostorové aproximace. Ve druhém případě je potřeba matice, protože úhlové koeficienty jsou funkcí prostorových koeficientů (nebo naopak). Neseparabilní zdroj může být zkonstruován pouze pomocí koeficientů zadaných uživatelem. Separabilní zdroj může být zkonstruován jako produkt úhlové a prostorové funkce. V programu jsou zatím implementovány základní funkce: plochá funkce (pro isotropní zdroje), delta Diracova funkce, špičatá funkce a polynomiální funkce.

4.2.5 Třídy speciálních funkcí

Tato skupina zahrnuje rutiny speciálních funkcí jako jsou Legendrovy funkce prvního a druhého druhu, které jsou využívány k vyhodnocení integrálů a rozvoji nebo Lambertovy W-funkce [16], které jsou nutné k vyhodnocení Henyey-Greensteinova rozptylového jádra. Rutina PhiPoly obsahuje dopředné a zpětné vyhodnocovací rutiny pro výpočet transportních polynomů, definovaných vztahem (2.35).

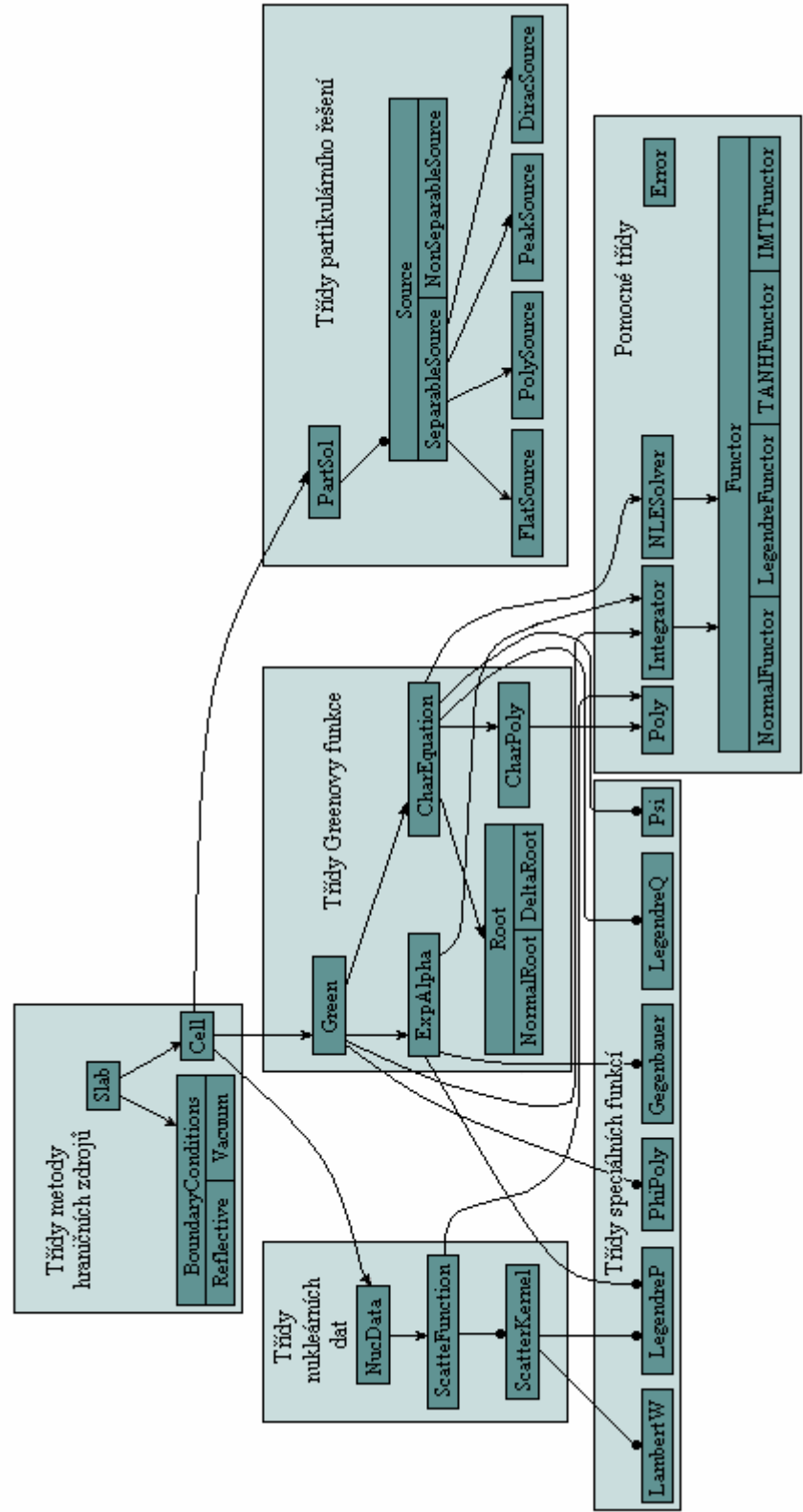
4.2.6 Pomocné třídy

Poslední skupina obsahuje třídy: Error, Poly, Functor, NLESolver a Integrátor. Třída Error (chyba) posílá chybové hlášení pokud dojde k nekorektní operaci (např. záporná šířka). Je zde rozlišení mezi kritickými chybami, které vždy zastaví průběh výpočtu, varováním a informativními zprávami.

Třída Poly zachází s běžnými polynomy. Mohou se konstruovat, vyhodnocovat, vypočítávat kořeny použitím companion matrix method [10]. Třída NLESolver řeší nelineární rovnice. Jsou zde implementovány tři metody: klasická bisekce, logaritmická bisekce a Van Wijngaarden-Decker-Brentova metoda.

Třída Integrátor vybírá mezi různými typy numerických kvadratur implementovaných ve zdrojovém kódu za účelem vyřešení spojitých částí úhlových momentů Greenovy funkce.

Obrázek 4.1 - Struktura programu Case [10]



4.3 Spuštění programu

Cílem této pracovní fáze bylo spuštění modelových problémů programu Case se stejnými výsledky, jakých bylo dosaženo Álvarem Garces Alonsem v [1]. Počátečním úkolem byla první kompilace programu a jeho následné spuštění. Díky značné rozsáhlosti programu a také díky tomu, že byl program tvořen několika osobami a neobsahuje téměř žádné komentáře, je velmi těžké se v něm vyznat. Výchozí fáze kompilace a spouštění proto zabrala velké množství času. Výsledky jsou demonstrovány na dvou modelových problémech: Cardona a Reed. U všech výsledků je vypočtena relativní difference mezi námi dosaženými výsledky a výsledky uvedenými v [1], podle vztahu

$$d_r = \frac{|x - y|}{\max(|x|, |y|)}. \quad (4.1)$$

4.3.1 Problém Cardona

Tento modelový problém obsahuje jednu buňku z homogenního materiálu s následujícími vlastnostmi:

Tabulka 4.1 - Parametry problému Cardona

parametr	hodnota v buňce 1
$\Sigma_s \text{ [cm}^{-1}\text{]}$	0,9
$\Sigma_t \text{ [cm}^{-1}\text{]}$	1,0
c	0,9
$a \text{ [cm]}$	100,0

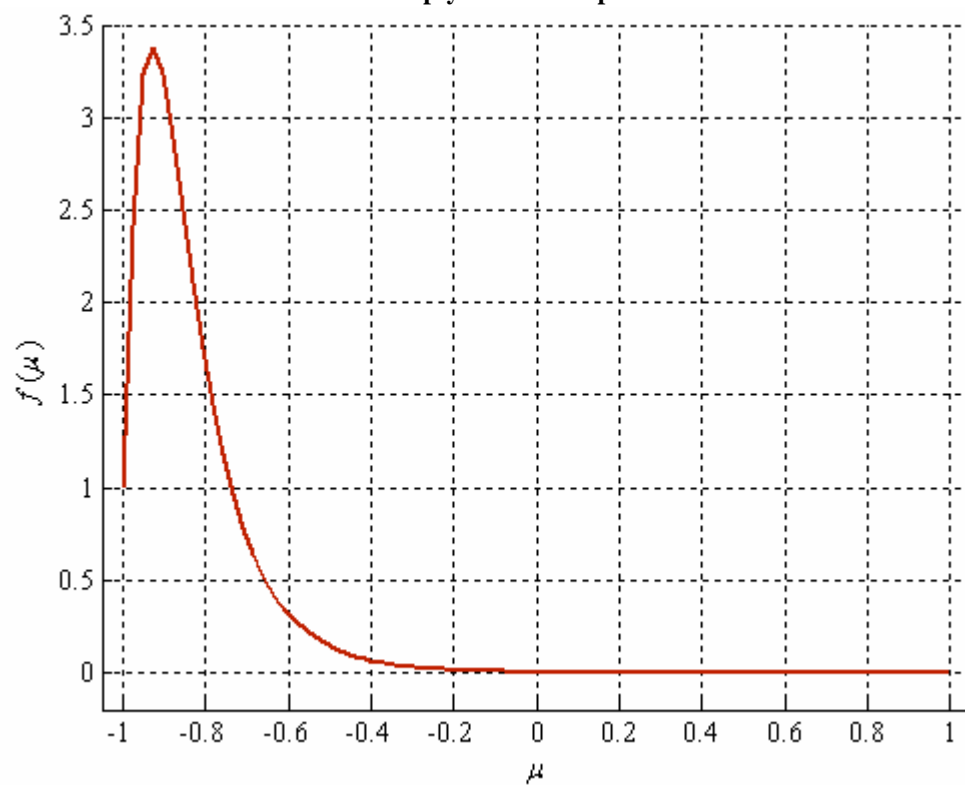
Hraniční podmínky jsou: na levé hranici vcházející neutronové rozdělení o hodnotě 0,5 a na pravé hranici vakuum. Řád metody hraničních zdrojů je $M = 20$. Rozptylová funkce je zadána přímo hodnotami a její graf lze vidět na obrázku 4.2.

Problém Cardona je řešen jak pro isotropní rozptyl, tak pro rozptyl anisotropní s řádem anisotropie $N = 50$ (zohledňujeme prvních 50 členů Legendrova rozvoje rozptylové funkce).

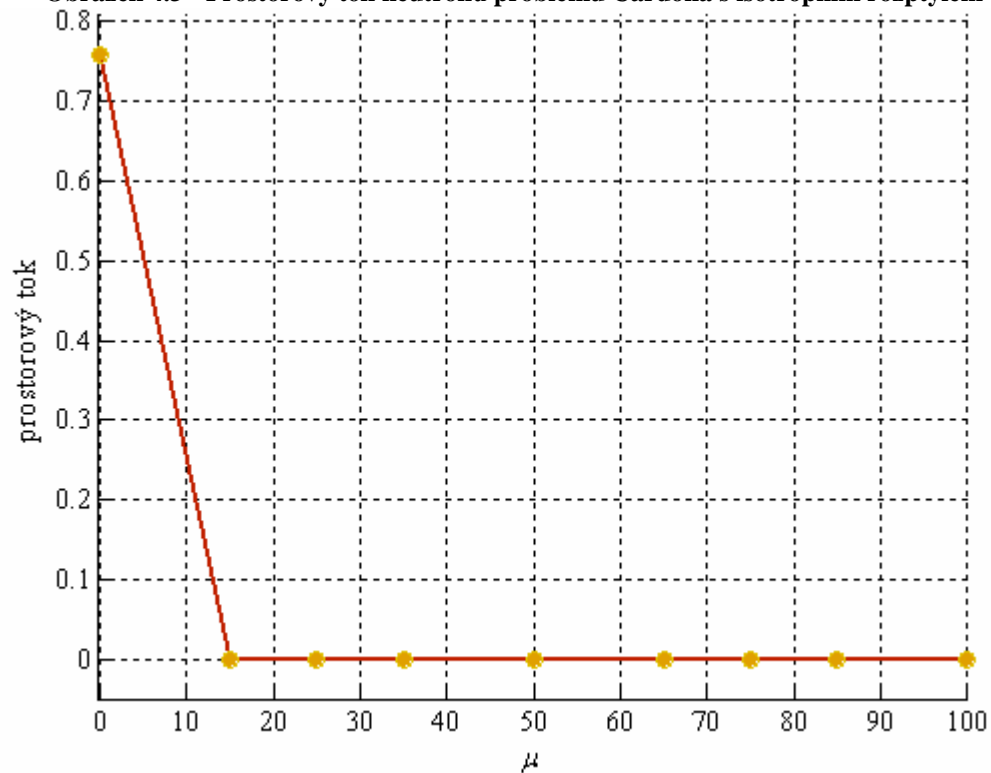
Výsledky prostorového toku neutronů problému Cardona s isotropním rozptylem a jejich relativní difference jsou, díky jejich obsáhlosti, uvedeny v příloze [2]. Výsledky prostorového toku neutronů problému Cardona s anisotropním rozptylem a jejich relativní difference jsou uvedeny v příloze [3]. Z uvedených tabulek je zřejmé, že se nám podařilo vypočítat prostorový tok shodně pro isotropní případ a jen s malými odchylkami řádu O^{-13} a menšími pro anisotropní případ.

Na obrázku 4.3 je znázorněn prostorový tok neutronů problému Cardona pro isotropní rozptyl a na obrázku 4.4 pro anisotropní rozptyl.

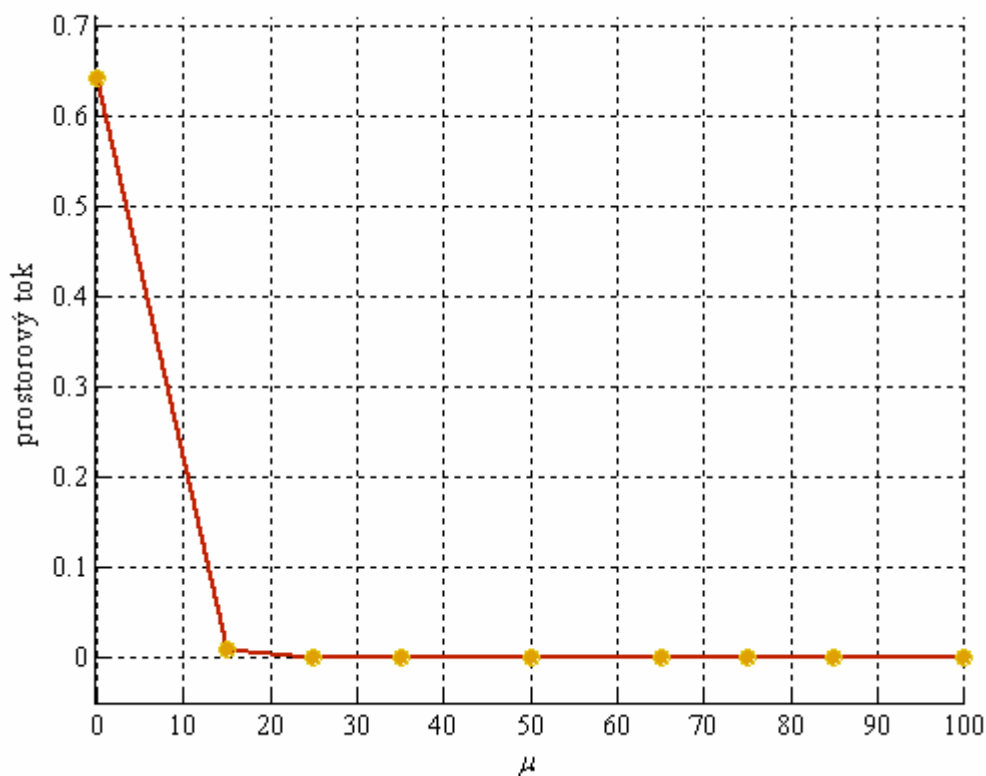
Obrázek 4.2 - Rozptylová funkce problému Cardona



Obrázek 4.3 - Prostorový tok neutronů problému Cardona s isotropním rozptylem



Obrázek 4.4 - Prostorový tok neutronů problému Cardona s anisotropním rozptylem



4.3.2 Problém Reed

Tento problém byl navržen pro ověření schopnosti programu pracovat s buňkami s různými nukleárními vlastnostmi. Problém se v tomto případě skládá z pěti sousedících buněk z neštěpitelného materiálu. Hraniční podmínka na levé hranici je odraz, zatímco na pravé hranici je vakuum. Do první a čtvrté buňky je umístěn isotropní zdroj. Parametry problému jsou uvedeny v tabulce 4.2

Tabulka 4.2 - Parametry problému Reed

parametr	buňka 1	buňka 2	buňka 3	buňka 4	buňka 5
Σ_s [cm ⁻¹]	50,0	5,0	0,0	1,0	1,0
c	0,0	0,0	0,0	0,9	0,9
Q	50,0	0,0	0,0	1,0	0,0
a [cm]	2,0	1,0	2,0	1,0	2,0

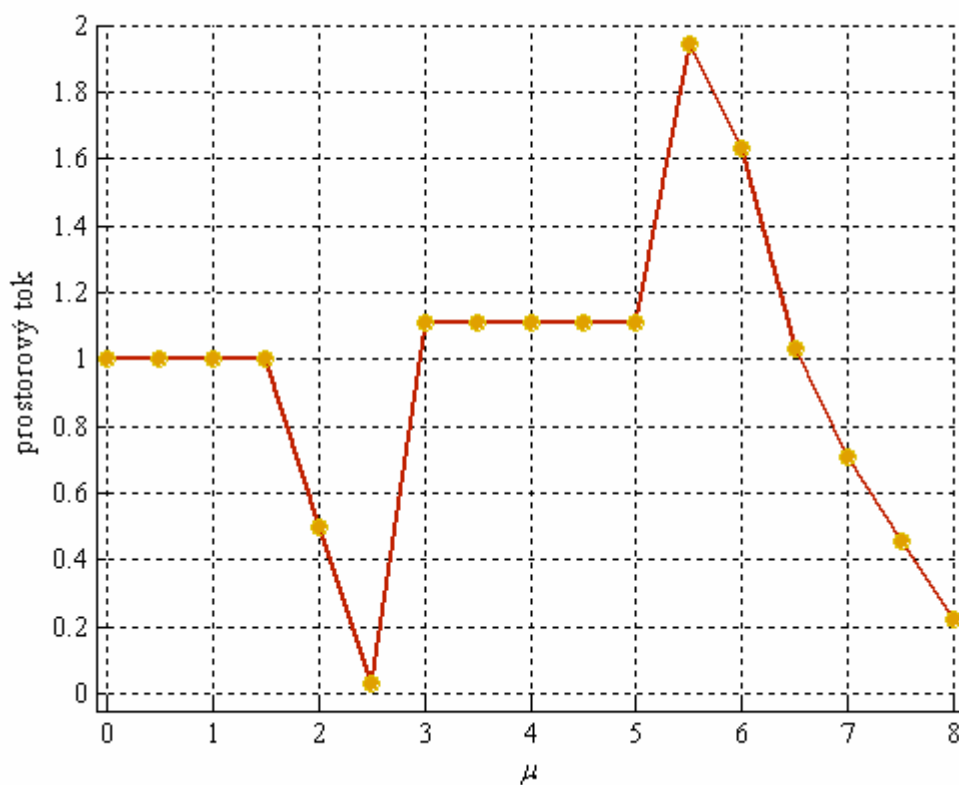
Jako rozptylové jádro je zde použito Henyey-Greensteinova rozptylová funkce s hodnotou parametru $g = 0,6$. Řád metody hraničních zdrojů je $M = 20$.

4 PROGRAM CASE

Problém Reed je řešen pouze pro isotropní rozptyl a výsledky prostorového toku neutronů, stejně jako jejich relativní difference jsou uvedeny v příloze [4]. Relativní difference mezi námi reprodukoványi výsledky a těmi uvedenými v [1] je řádově pouze O^{-10} .

Výsledný prostorový tok neutronů problému Reed s isotropní rozptylem je znázorněn obrázku 4.5.

Obrázek 4.5 - Prostorový tok neutronů problému Reed s isotropním rozptylem



5 Kvadraturní formule

Metoda hraničních zdrojů řeší úlohy neutronových transportních rovnic s vysokou přesností, je však výpočetně velmi náročná. Podle měření rozdělení výpočetního času jednotlivých procedur v [10] je až 75 % výpočetního času spotřebováno na vyhodnocení velkého počtu integrálů potřebných k výpočtu spojitě části úhlových Legendrových momentů Greenovy funkce nekonečného média (kapitola 3.5, rovnice (3.24) a (3.25)). V této kapitole provedeme analýzu tohoto integrálu, představíme kvadraturní formule Gaussova typu, pomocí kterých lze daný integrál vypočítat numericky, nakonec odhadneme chybu numerického výpočtu.

5.1 Analýza integrandu

Analýza integrandu byla provedena v [10] a [11]. Výpočet spojitě části úhlových Legendrových momentů Greenovy funkce nekonečného média zahrnuje vyhodnocení velkého počtu integrálů tvaru

$$\int_0^{+1} \frac{g_n(\nu)g_m(\nu)}{M(\nu)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/\nu} d\nu \quad \text{pro } x > x_0. \quad (5.1)$$

a pro m liché (kvůli jednoznačnosti problému, jak bylo uvedeno v kapitole 3.1). V integrandu z výrazu (5.1) můžeme rozlišit pro $x > x_0$ tři hlavní složky:

1. v čitateli obsažené
 - a. součin dvou vysoce oscilujících polynomů $g_n(\nu)$ a $g_m(\nu)$,
 - b. exponenciální funkci se záporným exponentem $((-1/\nu)$ zbytek v exponentu je vždy kladný), která z integrandu vymizí pro $x = x_0$ nebo pro $\Sigma_t \equiv 0$,
2. ve jmenovateli obsaženou složku normalizační funkce (2.42), která zahrnuje logaritmický výraz $\log(1 - \nu)$ v $PL(\nu)$.

Z výše uvedeného je zřejmé, že integrand obsahuje právě dvě singularity, a to v obou krajních bodech $\nu = 0$ a $\nu = +1$.

5.1.1 Singularity v bodě $\nu = 0$

Pro $\nu = 0$ jsou důležité tři faktory: hodnota Σ_t , hodnota $(x - x_0)$ a parita $(m + n)$. Jestliže je $(m + n)$ liché číslo, je polynom v čitateli také lichý a faktor ν je ve jmenovateli vyrušen. V případě, že je hodnota $(m + n)$ sudá, polynomy se navzájem nevyruší a singularity může vymizet jen díky exponenciální funkci v čitateli. Ve skutečnosti se pro $\nu \rightarrow 0$ blíží exponenciální funkce s exponentem $(-1/\nu)$ také k nule, ale rychleji a proto singularity vymizí. Exponenciální výraz v čitateli ovšem existuje jen pro případy, které nejsou ve vakuu ($\Sigma_t \neq 0$) a pro $x \neq x_0$. Problém v bodě $\nu = 0$ proto není skutečnou singularitou, limita existuje. Je zde však třeba věnovat zvláštní pozornost při implementaci, aby nedošlo při vyhodnocování integrandu k dělení nuly nulou (v tomto případě je v implementaci použito L'Hospitalovo pravidlo).

5.1.2 Singularita v bodě $\nu = +1$

Pro $\nu \rightarrow 1$ existuje v integrandu jediná singularita, a to díky funkci $\log(1 - \nu)$, která je obsažena ve jmenovateli. Limita integrandu ovšem existuje a jde k nule, protože $\lim_{\nu \rightarrow 1} M(\nu) = -\infty$. První derivace integrandu se však blíží k $+\infty$ pro $\nu \rightarrow 1$, což může numerické kvadratuře ztížit práci.

5.2 Ortogonální polynomy a Jacobiho matice

Dříve než přejdeme ke kvadraturám Gaussova typu, je namístě úvod o ortogonálních polynomech. Základem pro tuto kapitolu byly práce P.J.Davise a P.Rabinowitze [3] a W. Gautschiho [4].

5.2.1 Ortogonální polynomy

Ortogonalita je definována vzhledem ke skalárnímu součinu (5.5), který je využit při definici míry. Absolutně spojitá míra má tvar

$$d\lambda(x) = w(x)dx \text{ na } [a, b], \quad -\infty \leq a < b \leq \infty, \quad (5.2)$$

kde w označujeme jako váhovou funkci. Váhová funkce je většinou na intervalu (a, b) kladná a v tom případě označujeme $d\lambda$ jako kladnou míru a $[a, b]$ jako nosič. Diskrétní míra má tvar

$$d\lambda_N(x) = \sum_{k=1}^N w_k \delta(x - x_k) dx \quad x_1 < x_2 < \dots < x_N, \quad (5.3)$$

kde δ je Diracova delta funkce a obvykle platí $w_k > 0$. Nosič $d\lambda_N$ se skládá z N bodů x_1, x_2, \dots, x_N . Pro absolutně spojitou míru učiníme obvyklý předpoklad, že všechny momenty

$$\mu_r = \int_{\mathbb{R}} x^r d\lambda(x), \quad r = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.4)$$

existují a jsou konečné. Skalární součin dvou polynomů p a q vzhledem k míře $d\lambda$ je poté definován jako

$$(p, q)_{d\lambda} = \int_{\mathbb{R}} p(x)q(x)d\lambda(x), \quad (5.5)$$

a norma polynomu p jako

$$\|p\|_{d\lambda} = \sqrt{(p, p)_{d\lambda}}. \quad (5.6)$$

5 KVADRATURNÍ FORMULE

Ortogonalní polynomy vzhledem k míře $d\lambda$ jsou definovány pomocí $\pi_k(\cdot) = \pi_k(\cdot; d\lambda)$, polynomu stupně přesně k , $k = 0, 1, 2, \dots$, jako

$$(\pi_k, \pi_l)_{d\lambda} \begin{cases} = 0, & k \neq l, \\ > 0, & k = l. \end{cases} \quad (5.7)$$

Existuje jich nekonečně mnoho a jestliže je $d\lambda$ absolutně spojitá, jsou jednoznačně definovány vedoucím koeficientem (koeficientem u nejvyšší mocniny). Pokud jsou všechny vedoucí koeficienty rovny jedné, jedná se o tzv. monické polynomy. Pro diskrétní míru $d\lambda_N$ existuje právě N ortogonálních polynomů $\pi_0, \pi_1, \dots, \pi_{N-1}$.

Ortonormální polynomy jsou pak označeny a definovány jako

$$\tilde{\pi}_k(\cdot; d\lambda) = \frac{\pi_k(\cdot; d\lambda)}{\|\pi_k\|_{d\lambda}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.8)$$

a splňují

$$(\tilde{\pi}_k, \tilde{\pi}_l)_{d\lambda} = \delta_{k,l} = \begin{cases} 0, & k \neq l, \\ 1, & k = l. \end{cases} \quad (5.9)$$

Příklady klasických váhových funkcí a příslušných ortogonálních polynomů jsou uvedeny v tabulce 5.1. V tabulce 5.2 jsou uvedeny nejznámější diskrétní míry a příslušné ortogonální polynomy.

Tabulka 5.1 - Klasické váhové funkce $d\lambda(x) = w(x)dx$

název	označení	váhová funkce	nosič	poznámka
Gegenbauerovy	$C_n^{(\mu)}(x)$	$(1-x^2)^{\mu-1/2}$	$[-1, 1]$	$\mu > -1/2$
Hermitovy	$H_n(x)$	e^{-x^2}	$(-\infty, \infty)$	-
Jacobiho	$P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$	$(1-x)^\alpha (1+x)^\beta$	$[-1, 1]$	$\alpha, \beta > -1$
Laguerrovy	$L_n^{(\alpha)}(x)$	$x^\alpha e^{-x}$	$[0, \infty)$	$\alpha > -1$
Legendrovy	$P_n(x)$	1	$[-1, 1]$	-
Čebyševovy, 1.druhu	$T_n(x)$	$(1-x^2)^{-1/2}$	$[-1, 1]$	-
Čebyševovy, 2. druhu	$U_n(x)$	$(1-x^2)^{1/2}$	$[-1, 1]$	-

Tabulka 5.2 - Klasické diskrétní míry $d\lambda(x) = \sum_{k=0}^M w_k \delta(x - x_k) dx$

název	označení	w_k	M	poznámka
diskrétní Čebyševovy	$t_k(x)$	1	$N-1$	-
Hahnovy	$h_k^{(\alpha, \beta)}(x)$	$\binom{\alpha + \beta}{k} \binom{\alpha + N - k}{N - k}$	N	$\alpha, \beta > -1$
Charlierovy	$c_k^{(a)}(x)$	$\frac{e^{-a} a^k}{k!}$	∞	$a > 0$
Krawtchoukovy	$k_k^{(p)}(x)$	$\binom{N}{k} p^k (1 - p)^{N-k}$	N	$0 < p < 1$
Meixnerovy, 1. druhu	$m_k^{(\beta, c)}(x)$	$\frac{c^k}{\Gamma(\beta)} \frac{\Gamma(k + \beta)}{k!}$	∞	$0 < c < 1, \beta > -1$

Krawtchoukovy polynomy jsou v podstatě speciálním případem Meixnerových polynomů prvního druhu [17].

5.2.2 Tříčlenný rekurentní vztah

Pro každé n ($n < N-1$ v případě $d\lambda = d\lambda_N$) splňuje prvních $n+1$ monických ortogonálních polynomů tříčlenný rekurentní vztah

$$\begin{aligned} \pi_{k+1}(x) &= (x - \alpha_k) \pi_k(x) - \beta_k \pi_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \\ \pi_{-1}(x) &= 0, \quad \pi_0(x) = 1, \end{aligned} \quad (5.10)$$

kde rekurentní koeficienty α_k a β_k jsou reálné a kladné. Koeficient β_0 násobí ve vztahu (5.10) $\pi_{-1} = 0$ a proto může být určen libovolně. Koeficienty α_k , β_k jsou dány tzv. Christoffel - Darbouxovými formulemi

$$\alpha_k(d\lambda) = \frac{(x\pi_k, \pi_k)_{d\lambda}}{(\pi_k, \pi_k)_{d\lambda}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.11)$$

$$\beta_k(d\lambda) = \frac{(\pi_k, \pi_k)_{d\lambda}}{(\pi_{k-1}, \pi_{k-1})_{d\lambda}}, \quad k = 0, 1, 2, \dots. \quad (5.12)$$

Pro pozdější využití je vhodné definovat

$$\beta_0 = \beta_0(d\lambda) = \int_R d\lambda(x). \quad (5.13)$$

Tříčlenný rekurentní vztah pro ortonormální polynomy je

$$\begin{aligned}\sqrt{\beta_{k+1}}\tilde{\pi}_{k+1}(x) &= (x - \alpha_k)\tilde{\pi}_k(x) - \sqrt{\beta_k}\tilde{\pi}_{k-1}(x), \quad k = 0, 1, \dots, n-1, \\ \tilde{\pi}_{-1}(x) &= 0, \quad \tilde{\pi}_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\beta_0}}.\end{aligned}\tag{5.14}$$

5.2.3 Jacobiho matice

Umístěním koeficientů α_k na hlavní diagonálu a koeficientů $\sqrt{\beta_k}$ na dvě vedlejší diagonály v matici získáme tzv. Jacobiho matici míry $d\lambda$,

$$J(d\lambda) = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & \end{bmatrix}.\tag{5.15}$$

Jacobiho matice je třídiagonální, reálná, symetrická a všeobecně nekonečná. Její hlavní menší matice řádu n bude označena jako

$$J_n(d\lambda) = J(d\lambda)_{[1:n, 1:n]}.\tag{5.16}$$

Tříčlenný rekurentní vztah pro ortonormální polynomy lze pak psát v maticové formě s $\tilde{\pi}(x) = [\tilde{\pi}_0(x), \tilde{\pi}_1(x), \dots, \tilde{\pi}_{n-1}(x)]^T$ jako

$$x\tilde{\pi}(x) = J_n(d\lambda)\tilde{\pi}(x) + \sqrt{\beta_n}\tilde{\pi}_n(x)e_n,\tag{5.17}$$

kde e_n je n -tý sloupec jednotkové matice velikosti n . Jestliže označíme kořen ortonormálního polynomu $\tilde{\pi}_n(\cdot; d\lambda)$ jako τ_v , tj. $\tilde{\pi}_n(\tau_v) = 0$, platí

$$\tau_v \tilde{\pi}(\tau_v) = J_n(d\lambda)\tilde{\pi}(\tau_v).\tag{5.18}$$

Protože je $\tilde{\pi}_0(\tau_v) \neq 0$, je $\tilde{\pi}(\tau_v) \neq \mathbf{0}$. Odtud vidíme, že kořeny τ_v polynomu $\tilde{\pi}_n(\cdot; d\lambda)$ jsou přesně vlastními čísly matice $J_n(d\lambda)$ a $\tilde{\pi}(\tau_v)$ je příslušný vlastní vektor. To je jedním z mnoha důvodů, proč má znalost Jacobiho matice a rekurentních koeficientů velký praktický význam. Pro klasické míry, uvedené v tabulce 5.1 a tabulce 5.2, jsou všechny rekurentní koeficienty známy explicitně. Ve většině ostatních případů je třeba tyto koeficienty vypočítat numericky.

5.2.4 Příklady ortogonálních polynomů

1. Gegenbauerovy polynomy

Označení: $C_n^{(\mu)}(x)$ Interval: $[-1, +1]$ Váhová funkce: $(1-x^2)^{\mu-1/2}$, $\mu > -\frac{1}{2}$

Standardizace:

$$C_n^{(\mu)}(1) = \binom{n+2\mu-1}{n}$$

Norma:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{\mu-1/2} [C_n^{(\mu)}(x)]^2 dx = \frac{\pi 2^{1-2\mu} \Gamma(n+2\mu)}{n!(n+\mu)[\Gamma(\mu)]^2}$$

Explicitní vyjádření:

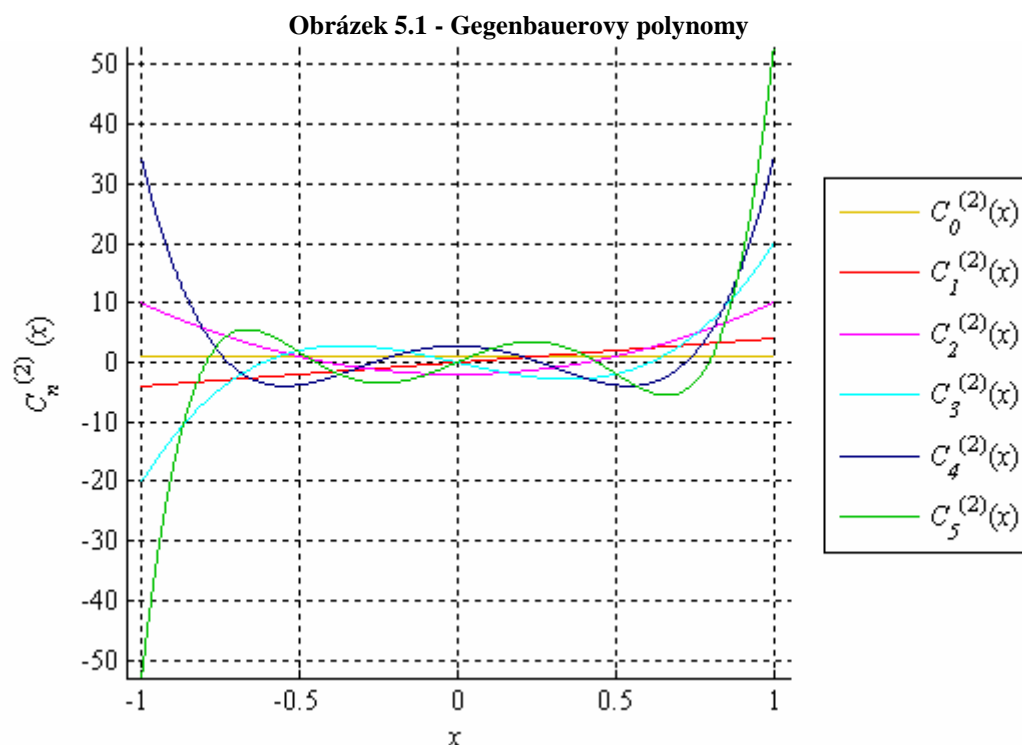
$$C_n^{(\mu)}(x) = \frac{1}{\Gamma(\mu)} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{\Gamma(\mu+n-m)}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m}$$

Rekurentní vztah:

$$(n+1)C_{n+1}^{(\mu)}(x) = 2(n+\mu)x C_n^{(\mu)}(x) - (n+2\mu-1)C_{n-1}^{(\mu)}(x),$$

$$C_0^{(\mu)}(x) = 1, \quad C_1^{(\mu)}(x) = 2\mu x$$

Na obrázku 5.1 je vykresleno prvních šest Gegenbauerových ortogonálních polynomů.



2. Hermitovy polynomy

Označení: $H_n(x)$

Interval: $(-\infty, +\infty)$

Váhová funkce: e^{-x^2}

Norma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} [H_n(x)]^2 dx = \sqrt{\pi} 2^n n!$$

Explicitní vyjádření:

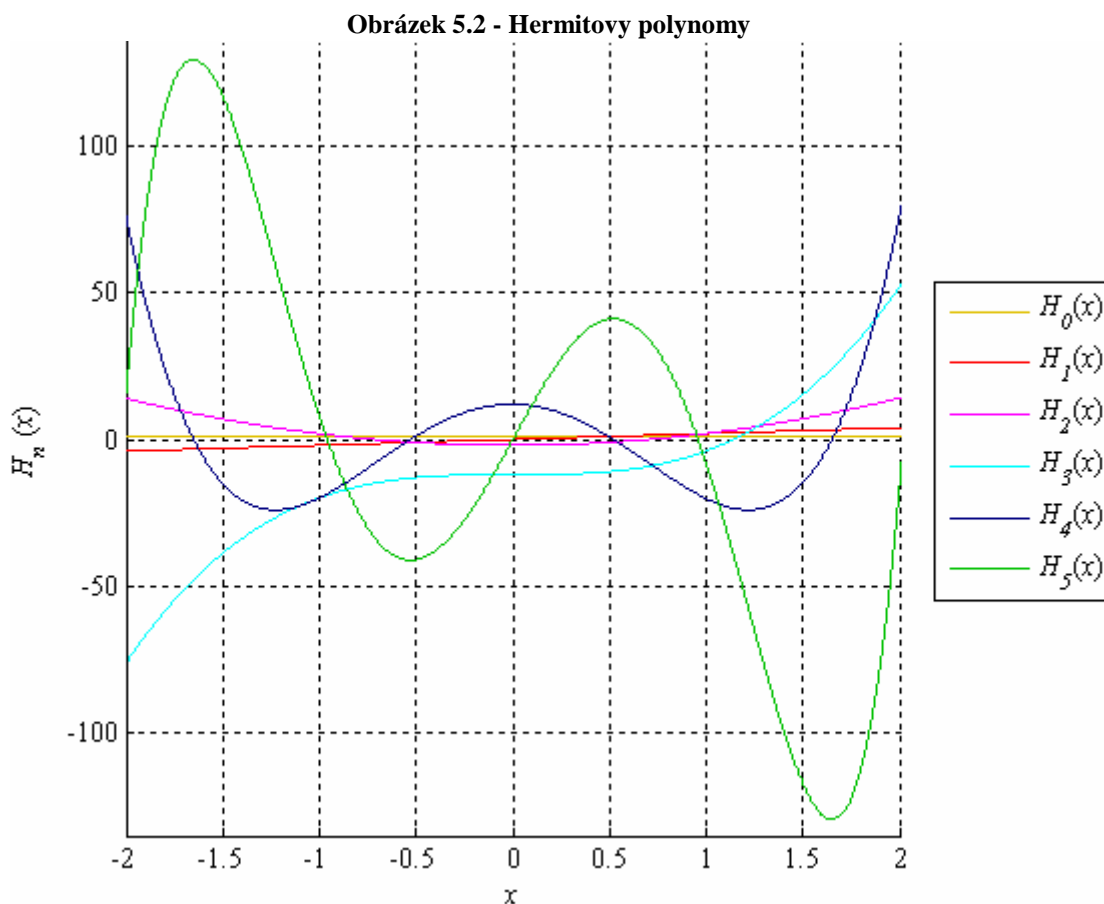
$$H_n(x) = n! \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(2x)^{n-2m}}{m!(n-2m)!}$$

Rekurentní vztah:

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x),$$

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x$$

Na obrázku 5.2 je vykresleno prvních šest Hermitových ortogonálních polynomů.



3. Jacobiho polynomy

Označení: $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ Interval: $[-1, +1]$ Váhová funkce: $(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$, $\alpha, \beta > -1$
 Standardizace:

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(1) = \binom{n+\alpha}{n}$$

Norma:

$$\int_{-1}^1 (1-x)^\alpha (1+x)^\beta [P_n^{(\alpha,\beta)}(x)]^2 dx = \frac{2^{\alpha+\beta+1} \Gamma(n+\beta+1)}{(2n+\alpha+\beta+1)n! \Gamma(n+\alpha+\beta+1)}$$

Explicitní vyjádření:

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^n \binom{n+\alpha}{m} \binom{n+\beta}{n-m} (x-1)^{n-m} (x+1)^m$$

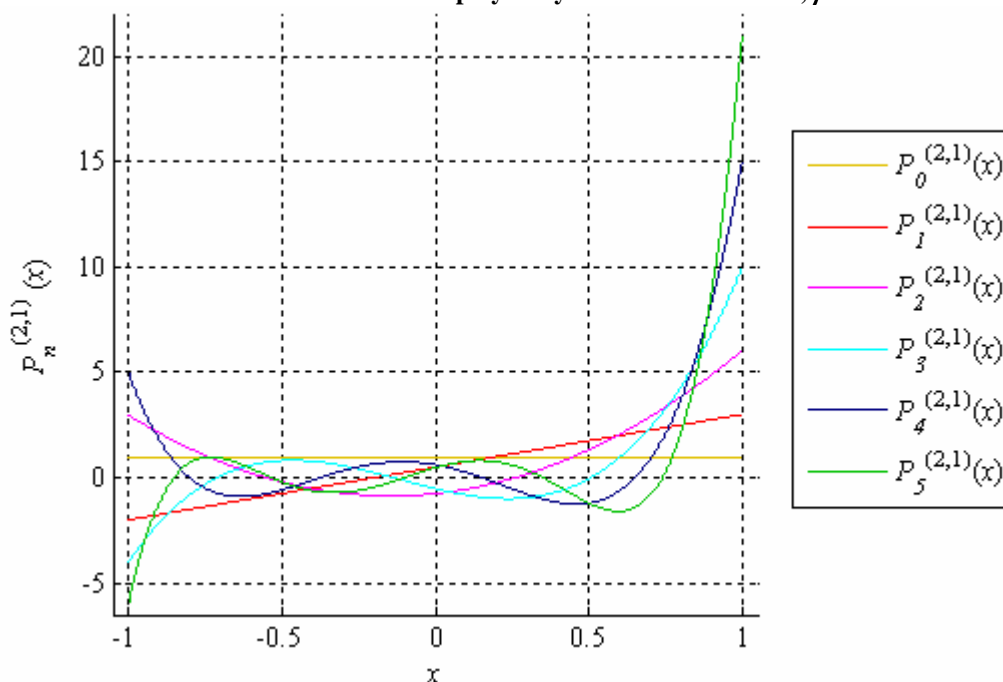
Rekurentní vztah:

$$\begin{aligned} 2(n+1)(n+\alpha+\beta+1)(2n+\alpha+\beta)P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = \\ (2n+\alpha+\beta+1)[(\alpha^2-\beta^2) + (2n+\alpha+\beta+2)(2n+\alpha+\beta)x]P_n^{(\alpha,\beta)}(x) - \\ - 2(n+\alpha)(n+\beta)(2n+\alpha+\beta+2)P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x), \end{aligned}$$

$$P_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1, \quad P_1^{(\alpha,\beta)}(x) = \left(1 + \frac{1}{2}(\alpha+\beta)\right)x + \frac{1}{2}(\alpha-\beta)$$

Na obrázku 5.3 je vykresleno prvních šest Jacobiho ortogonálních polynomů s koeficientem $\alpha=2, \beta=1$.

Obrázek 5.3 - Jacobiho polynomy s koeficientem $\alpha=2, \beta=1$



4. Obecné Laguerrovy polynomy

Označení: $L_n^{(\alpha)}(x)$

Interval: $[0, +\infty)$

Váhová funkce: $x^\alpha e^{-x}$, $\alpha > -1$

Norma:

$$\int_0^\infty x^\alpha e^{-x} [L_n^{(\alpha)}(x)]^2 dx = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}$$

Explicitní vyjádření:

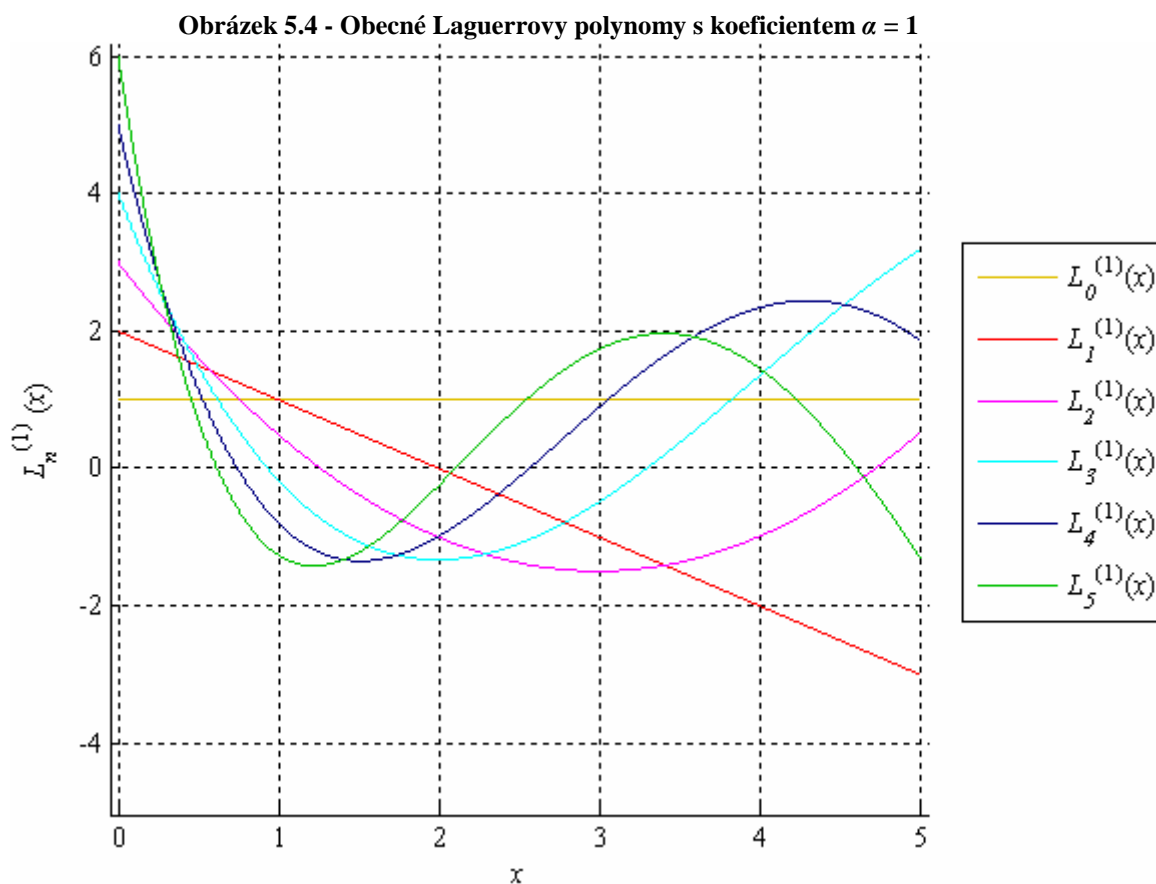
$$L_n^{(\alpha)}(x) = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n+\alpha}{n-m} \frac{1}{m!} x^m$$

Rekurentní vztah:

$$(n+1)L_{n+1}^{(\alpha)}(x) = [(2n+\alpha+1)-x]L_n^{(\alpha)}(x) - (n+\alpha)L_{n-1}^{(\alpha)}(x),$$

$$L_0^{(\alpha)}(x) = 1, \quad L_1^{(\alpha)}(x) = 1 + \alpha - x$$

Na obrázku 5.4 je vykresleno prvních šest Laguerrových ortogonálních polynomů a koeficientem $\alpha = 1$.



5. Legendrovy polynomy

Označení: $P_n(x)$

Interval: $[-1, +1]$

Váhová funkce: 1

Standardizace:

$$P_n(1) = 1$$

Norma:

$$\int_{-1}^1 [P_n(x)]^2 dx = \frac{2}{(2n+1)}$$

Explicitní vyjádření:

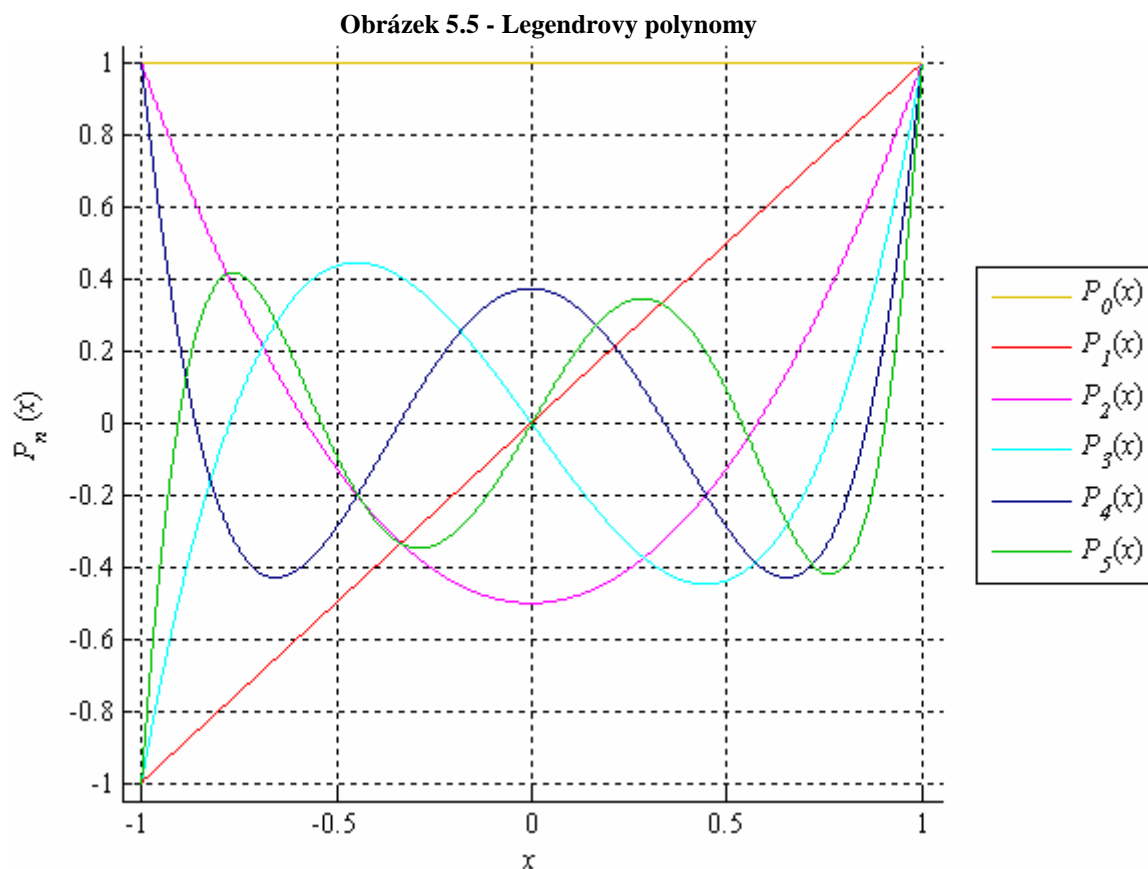
$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \binom{n}{m} \binom{2n-2m}{n} x^{n-2m}$$

Rekurentní vztah:

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x),$$

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x$$

Na obrázku 5.5 je vykresleno prvních šest Legendrových ortogonálních polynomů.



6. Čebyševovy polynomy 1. druhu

Označení: $T_n(x)$

Interval: $[-1, +1]$

Váhová funkce: $(1-x^2)^{-1/2}$

Standardizace:

$$T_n(1) = 1$$

Norma:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{-1/2} [T_n(x)]^2 dx = \begin{cases} \pi/2, & n \neq 0 \\ \pi, & n = 0 \end{cases}$$

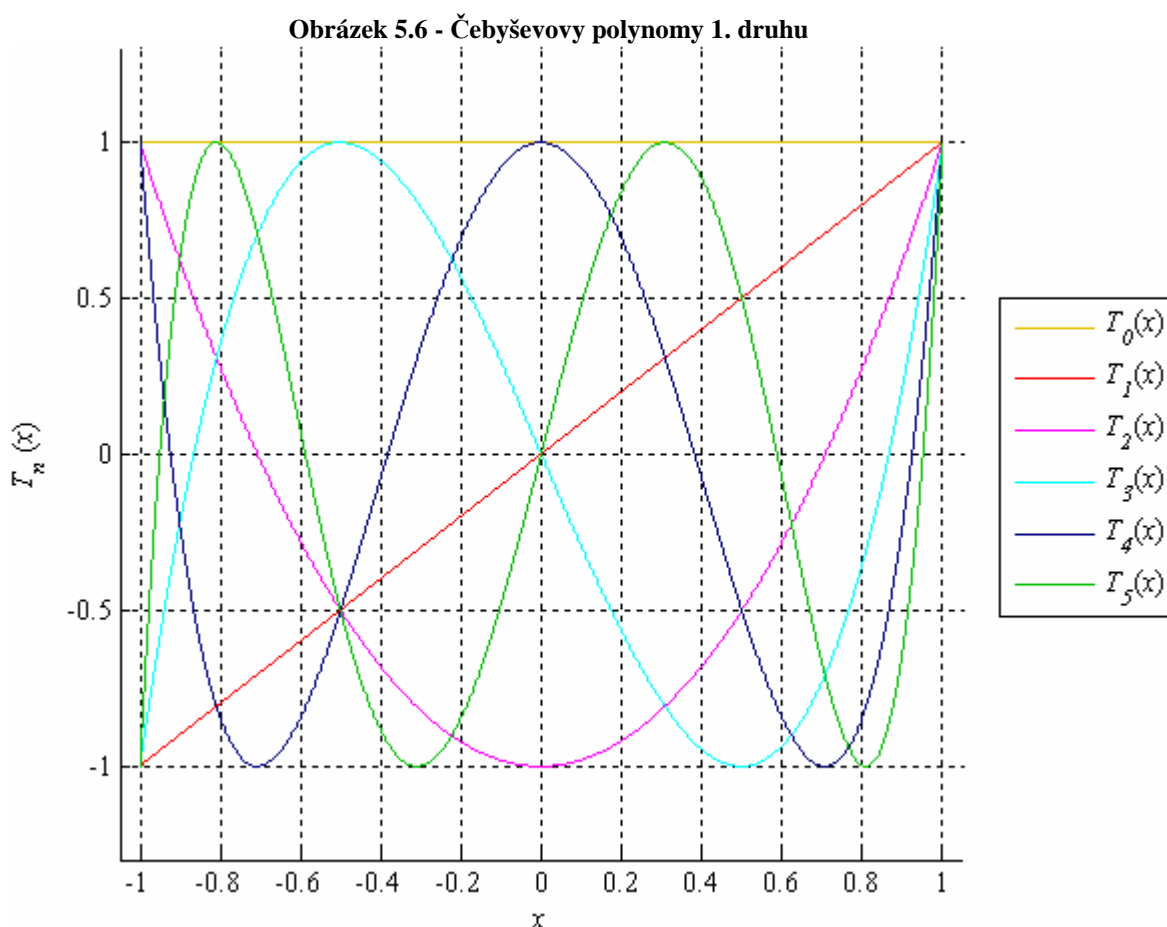
Explicitní vyjádření:

$$T_n(x) = \frac{n}{2} \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(n-m-1)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} = \cos(n \arccos(x))$$

Rekurentní vztah:

$$\begin{aligned} T_{n+1}(x) &= 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \\ T_0(x) &= 1, \quad T_1(x) = x \end{aligned}$$

Na obrázku 5.6 je vykresleno prvních šest Čebyševových ortogonálních polynomů 1. druhu.



7. Čebyševovy polynomy 2. druhu

Označení: $U_n(x)$

Interval: $[-1, +1]$

Váhová funkce: $(1-x^2)^{1/2}$

Standardizace:

$$U_n(1) = n + 1$$

Norma:

$$\int_{-1}^1 (1-x^2)^{1/2} [U_n(x)]^2 dx = \pi / 2$$

Explicitní vyjádření:

$$U_n(x) = \sum_{m=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} (-1)^m \frac{(m-n)!}{m!(n-2m)!} (2x)^{n-2m} = \frac{T'_{n+1}(x)}{n+1}$$

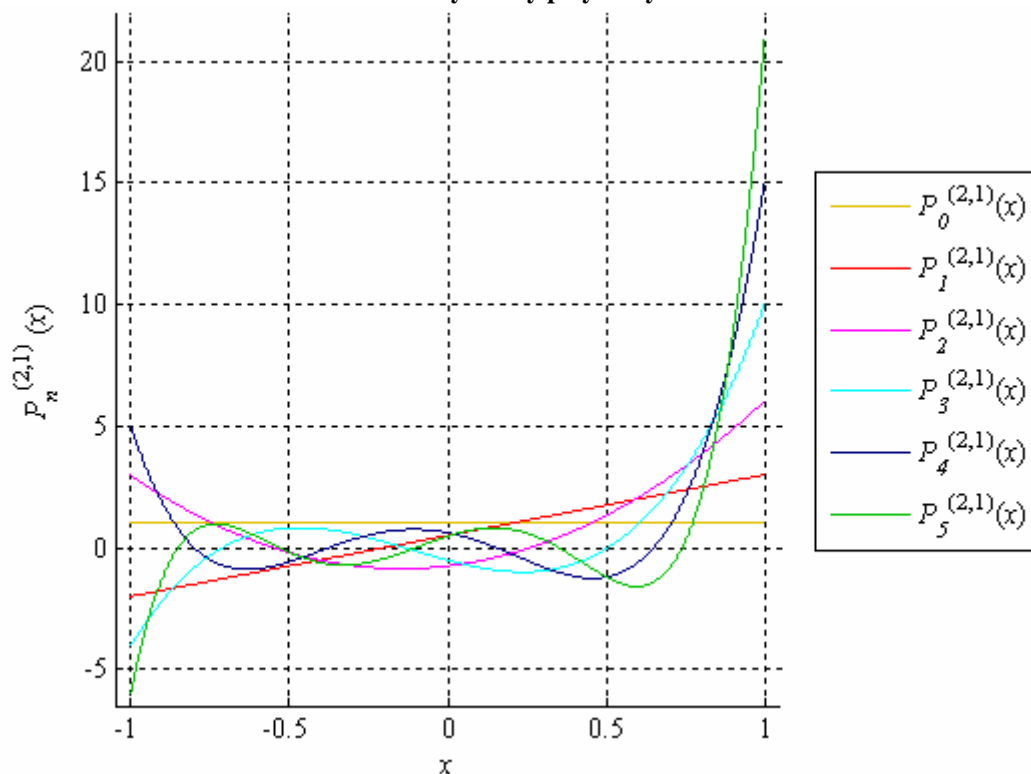
Rekurentní vztah:

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x),$$

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x$$

Na obrázku 5.7 je vykresleno prvních šest Čebyševových ortogonálních polynomů 2. druhu.

Obrázek 5.7 - Čebyševovy polynomy 2. druhu



5.3 Gaussova kvadratura

Jestliže máme danou kladnou míru $d\lambda$, pak k ní přidružená n -bodová Gaussova kvadratura je dána vztahem

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) d\lambda(x) = \sum_{i=1}^n w_i^G f(x_i^G) + R_n^G(f), \quad (5.19)$$

která má maximální algebraický stupeň přesnosti $2n-1$

$$R_n^G(f) = 0 \quad \forall f \in \mathbb{P}^{2n-1}, \quad (5.20)$$

kde \mathbb{P}^{2n-1} označuje prostor polynomů stupně ne většího než $2n-1$. Při hledání optimálních uzlových bodů x_i^G ve kterých vyhodnotíme funkci $f(x_i^G)$ takových, aby výsledná chyba numerické integrace bylo co nejmenší, vycházíme ze základního teorému Gaussovy kvadratury [14]. Ten určuje optimální uzlové body n -bodové Gaussovy kvadratury jako kořeny τ_v^G ortogonálního polynomu $\pi_n(\cdot; d\lambda)$ na stejném intervalu. Potom existuje i n vah w_i^G (označíme je λ_v^G), které zaručí, že je výpočet integrálu pomocí takto zvolené Gaussovy kvadratury přesný pro všechny polynomy stupně ne většího než $2n-1$. Vztah (5.19) potom můžeme přepsat jako

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) d\lambda(x) = \sum_{v=1}^n \lambda_v^G f(\tau_v^G) + R_n^G(f). \quad (5.21)$$

Jak je uvedeno v kapitole 5.2.3, kořeny τ_v^G ortogonálního polynomu $\pi_n(\cdot; d\lambda)$ jsou vlastní čísla Jacobiho matice $J_n(d\lambda)$. Jak je dokázáno (Golub a Welsch, 1969) váhy λ_v^G mohou být vyjádřeny pomocí spektrálních dat matice $J_n(d\lambda)$. Jsou dány vztahem

$$\lambda_v^G = \beta_0 \mathbf{v}_{v,1}^2, \quad (5.22)$$

kde $\mathbf{v}_{v,1}$ je první složka normalizovaného vlastního vektoru \mathbf{v}_v příslušnému k vlastnímu číslu τ_v^G ,

$$J_n(d\lambda) \mathbf{v}_v = \tau_v^G \mathbf{v}_v, \quad \mathbf{v}_v^T \mathbf{v}_v = 1. \quad (5.23)$$

Z Jacobiho matice $J_n(d\lambda)$ tak dostaneme kompletní informaci o uzlových bodech a koeficientech Gaussovy kvadratury.

5.3.1 Gauss-Chandrasekharova kvadratura

V kapitole 2.4 byly rovnicí (2.35) představeny Chandrasekharovy (transportní) polynomy. Tyto polynomy splňují tříčlenný rekurentní vztah a jsou ortogonální [10] na intervalu $[-1, +1] \cup \{v_j, -v_j\}_{j=1, \dots, M}$ vzhledem k váhové funkci

$$w(v) = \frac{v}{M(v)} U_{(-1,+1)}(v) + \sum_{j=1}^M \frac{v_j}{M_j} [\delta(v - v_j) + \delta(v + v_j)], \quad (5.24)$$

kde v_j jsou kladná diskrétní vlastní čísla, M_j je příslušná norma vlastní funkce dána vztahem (2.41), $M(v)$ je normalizační faktor daný vztahem (2.42) a $U_{(-1,+1)}(v)$ je charakteristická funkce na intervalu $[-1,+1]$.

V metodě hraničních zdrojů potřebujeme vypočítat integrál z funkce

$$f(v) = \frac{g_n(v)g_m(v)}{M(v)} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v}, \quad (5.25)$$

jestliže aplikujeme Gaussův kvadraturní vzorec (5.21) s Chandrasekharovými polynomy a váhovou funkcí danou vztahem (5.24), dostaneme [1]

$$\begin{aligned} \int_{-v_1}^{+v_1} w(v)f(v)dv &= \sum_{j=1}^M \frac{v_j}{M_j} \int_{-v_1}^{-1} \delta(v + v_j)f(v)dv + \int_{-1}^{+1} \frac{v}{M(v)} \frac{g_n(v)g_m(v)}{v} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv \\ &+ \sum_{j=1}^M \frac{v_j}{M_j} \int_{+1}^{+v_1} \delta(v - v_j)f(v)dv. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Po použití vlastnosti Diracovy delta funkce dostaneme

$$\int_{-v_1}^{+v_1} w(v)f(v)dv = \int_{-1}^{+1} \frac{v}{M(v)} \frac{g_n(v)g_m(v)}{v} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv + \sum_{j=1}^M \frac{v_j}{M_j} [f(v_j) + f(-v_j)] \quad (5.27)$$

a podle vztahu (5.21)

$$\int_{-v_1}^{+v_1} w(v)f(v)dv = \sum_{i=1}^n w_i f(v_i), \quad (5.28)$$

kde v_i jsou kořeny Chandrasekharova polynomu a w_i příslušné váhy dostaneme

$$\int_{-1}^{+1} \frac{v}{M(v)} \frac{g_n(v)g_m(v)}{v} e^{-\Sigma_t(x-x_0)/v} dv = \sum_{i=1}^n w_i f(v_i) + \sum_{j=1}^M \frac{v_j}{M_j} [f(v_j) + f(-v_j)] \quad (5.29)$$

kde $f(v)$ je dána vztahem (5.25).

Jeden problém ovšem stále zůstává. Ve vztahu (5.1) potřebujeme vypočítat integrál na intervalu $[0,+1]$. Toho lze dosáhnout vydělením numericky vypočítané hodnoty pomocí vztahu (5.29) dvěma. Tento postup je ale použitelný jen pokud je funkce $f(v)$ sudá. Ta je buď sudá, nebo lichá v závislosti na parametrech m a n . Jestliže je funkce $f(v)$ lichá, je integrál na intervalu $[-1,+1]$ z definice nulový a Gauss-Chandrasekharovu kvadraturu nelze použít. V takovém případě je pak při výpočtu nutné použít obecné rutiny [11].

5.4 Odhad chyby Gaussovy kvadratury

Dirk P. Laurie [7] navrhl způsob, jakým lze odhadnout chybu numerické integrace R_n^G pomocí tzv. anti-Gaussovy kvadraturní formule.

Anti-Gaussova kvadraturní formule je $(n + 1)$ -bodová formule stupně $2n - 1$, která integruje polynomy vyššího stupně než $2n + 1$ s chybou o stejné velikosti, ale opačného znaménka, jako n -bodová Gaussova kvadratura. Platí tedy

$$\int_{\mathbb{R}} f(x) d\lambda(x) = \sum_{i=1}^{n+1} w_i^A f(x_i^A) + R_{n+1}^A(f), \quad (5.30)$$

$$R_{n+1}^A(f) = 0 \quad \forall f \in \mathbb{P}^{2n+1}, \quad (5.31)$$

$$R_n^G(f) = -R_{n+1}^A(f). \quad (5.32)$$

Chybu Gaussovy numerické integrace lze poté odhadnout jako polovinu z rozdílu výsledků Gaussovy numerické integrace a příslušné anti-Gaussovy numerické integrace.

Označíme-li

$$G^{(n)}f := \sum_{v=1}^n \lambda_v^G f(\tau_v^G) \quad \text{a} \quad A^{(n+1)}f := \sum_{i=1}^{n+1} w_i^A f(x_i^A), \quad (5.33)$$

můžeme pro odhad chyby psát

$$R_{n+1}^A(f) = \frac{(A^{(n+1)}f - G^{(n)}f)}{2}. \quad (5.34)$$

Při výpočtu uzlových bodů x_i^A a vah w_i^A anti-Gaussovy kvadratury $A^{(n+1)}f$ je použit téměř stejný postup, jako při výpočtu $G^{(n+1)}f$, kromě posledního koeficientu β_{n+1} v Jacobiho matici $\mathbf{J}_{n+1}(d\lambda)$, který je zde násoben dvěma

$$\mathbf{J}_{n+1}(d\lambda) = \begin{bmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \sqrt{2\beta_{n+1}} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2\beta_{n+1}} & \alpha_n \end{bmatrix}. \quad (5.35)$$

6 Numerické experimenty

V této kapitole provedeme porovnání přesnosti Gaussovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla, předvedeme přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury pomocí Anti-Gaussovy kvadratury a nastíníme myšlenku zpřesnění výpočtu pomocí složené Gaussovy kvadratury. Numerické experimenty byly prováděny v prostředí MATLAB [8].

6.1 Porovnání Gaussovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla

Porovnání bylo provedeno s výsledky uveřejněnými v [3, str. 59]. Zde jsou pomocí složeného Simpsonova pravidla vypočteny hodnoty určitých integrálů

$$\begin{aligned} \text{i. } \int_0^1 f_1(x) dx &= \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} dx, & \text{ii. } \int_0^1 f_2(x) dx &= \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx, \\ \text{iii. } \int_0^1 f_3(x) dx &= \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx, & \text{iv. } \int_0^1 f_4(x) dx &= \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx, \end{aligned}$$

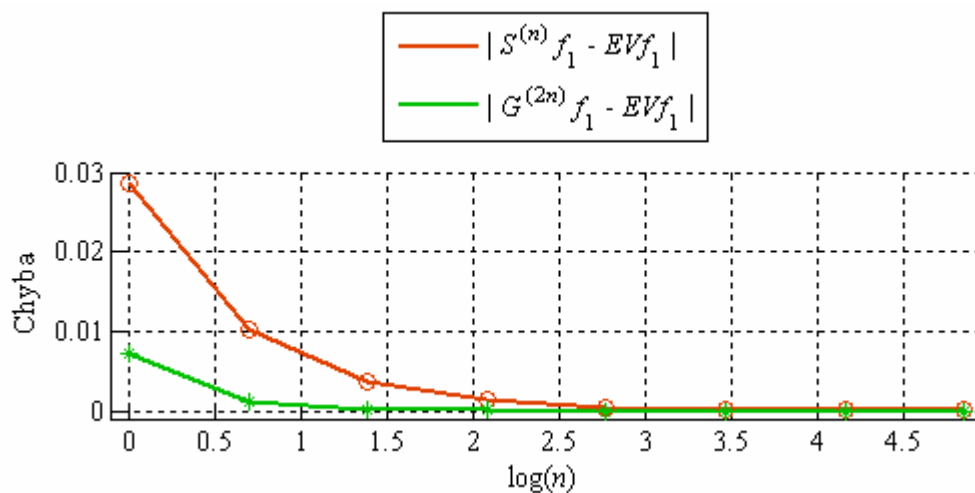
s přesností na osm desetinných míst. Budeme porovnávat přesnost výpočtu pro stejný počet vyhodnocení integrované funkce f , tzn. u složeného Simpsonova pravidla řádu n (ozn. $S^{(n)}f$) musíme integrovanou funkci vyhodnotit $2n$ -krát, na rozdíl od Gaussovy kvadratury $G^{(n)}f$ řádu n , kde se integrovaná funkce vyhodnotí n -krát. Při výpočtu použijeme Gauss-Legendrovu kvadraturní formuli.

Výsledky numerických výpočtů pro jednotlivé určité integrály jsou uvedeny v tabulkách 6.1, 6.2, 6.3, 6.4. Pro přehlednost je na obrázcích 6.1, 6.2, 6.3 a 6.4 znázorněn vývoj chyb v závislosti na zvyšujícím se řádu n . Chyby jsou zde určeny jako odchylky od analyticky vypočtené hodnoty, kterou označíme EVf .

Tabulka 6.1 - Porovnání Gauss-Legendrovky kvadratury a složeného Simpsonova pravidla i.

$\int_0^1 f_1(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} dx = 0,66666667 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_1}$				
n	$S^{(n)}f_1$	$ S^{(n)}f_1 - EVf_1 $	$G^{(2n)}f_1$	$ G^{(2n)}f_1 - EVf_1 $
1	0,63807119	0,02859548	0,67388734	0,00722067
2	0,65652627	0,01014040	0,66782765	0,00116098
4	0,66307925	0,00358742	0,66683558	0,00016891
8	0,66539813	0,00126854	0,66668963	0,00002296
16	0,66621804	0,00044863	0,66666967	0,00000300
32	0,66650782	0,00015885	0,66666705	0,00000038
64	0,66661024	0,00005643	0,66666672	0,00000005
128	0,66664641	0,00002026	0,66666667	0,00000000

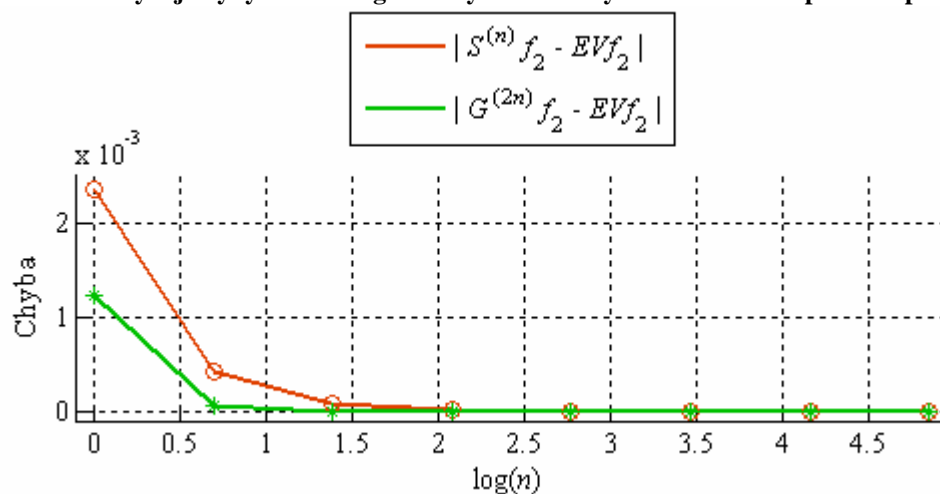
Obrázek 6.1 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla i.



Tabulka 6.2 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla ii.

$\int_0^1 f_2(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx = 0,40000000 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_2}$				
n	$S^{(n)}f_2$	$ S^{(n)}f_2 - EVf_2 $	$G^{(2n)}f_2$	$ G^{(2n)}f_2 - EVf_2 $
1	0,40236892	0,00236892	0,39877398	0,00122602
2	0,40043191	0,00043191	0,39995039	0,00004961
4	0,40007723	0,00007723	0,39999809	0,00000191
8	0,40001368	0,00001368	0,39999993	0,00000007
16	0,40000235	0,00000235	0,40000000	0,00000000
32	0,40000033	0,00000033	0,40000000	0,00000000
64	0,39999984	0,00000016	0,40000000	0,00000000
128	0,39999973	0,00000027	0,40000000	0,00000000

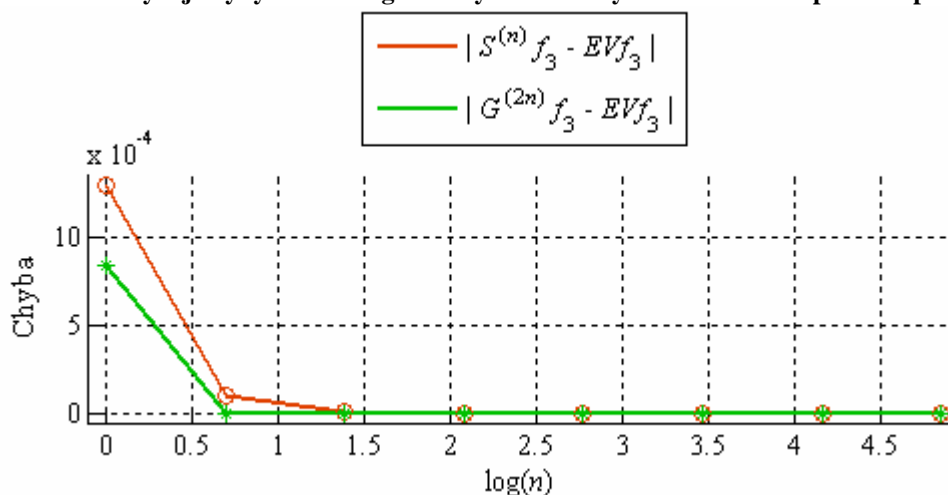
Obrázek 6.2 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla ii.



Tabulka 6.3 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iii.

$\int_0^1 f_3(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx = 0,69314718 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_3}$				
n	$S^{(n)}f_3$	$ S^{(n)}f_3 - EVf_3 $	$G^{(2n)}f_3$	$ G^{(2n)}f_3 - EVf_3 $
1	0,69444444	0,00129726	0,69230769	0,00083949
2	0,69325395	0,00010677	0,69314642	0,00000076
4	0,69315450	0,00000732	0,69314718	0,00000000
8	0,69314759	0,00000041	0,69314718	0,00000000
16	0,69314708	0,00000010	0,69314718	0,00000000
32	0,69314683	0,00000035	0,69314718	0,00000000
64	0,69314670	0,00000048	0,69314718	0,00000000
128	0,69314664	0,00000054	0,69314718	0,00000000

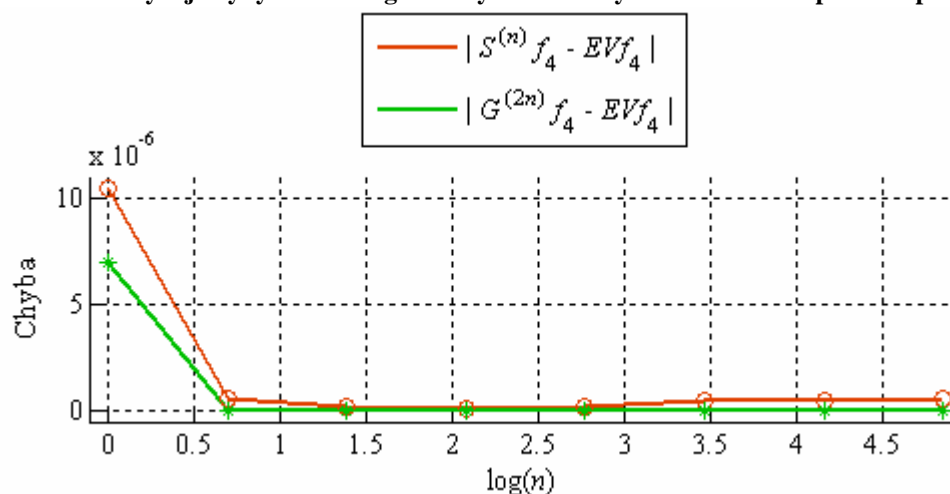
Obrázek 6.3 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iii.



Tabulka 6.4 - Porovnání Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iv.

$\int_0^1 f_4(x) dx = \int_0^1 \frac{x}{e^x - 1} dx = 0,77750463 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_4}$				
n	$S^{(n)}f_4$	$ S^{(n)}f_4 - EVf_4 $	$G^{(2n)}f_4$	$ G^{(2n)}f_4 - EVf_4 $
1	0,77749413	0,00001050	0,77751164	0,00000701
2	0,77750400	0,00000063	0,77750463	0,00000000
4	0,77750446	0,00000017	0,77750463	0,00000000
8	0,77750450	0,00000013	0,77750463	0,00000000
16	0,77750438	0,00000025	0,77750463	0,00000000
32	0,77750416	0,00000047	0,77750463	0,00000000
64	0,77750411	0,00000052	0,77750463	0,00000000
128	0,77750407	0,00000056	0,77750463	0,00000000

Obrázek 6.4 - Vývoj chyby Gauss-Legendrovy kvadratury a složeného Simpsonova pravidla iv.



Z uvedených výsledků je zřetelná až dvojnásobně vyšší přesnost Gauss-Legendrovy kvadratury. To je nejlépe patrné při nižším řádu n , kdy chyba výpočtu ještě není nulová.

6.2 Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury

Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury určeného vztahem (5.34) byla testována na následujících určitých integrálech

$$\text{i. } \int_0^1 f_2(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx,$$

$$\text{ii. } \int_0^1 f_3(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx,$$

$$\text{iii. } \int_0^1 f_4(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x^4} dx,$$

$$\text{iv. } \int_0^1 f_5(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+e^x} dx,$$

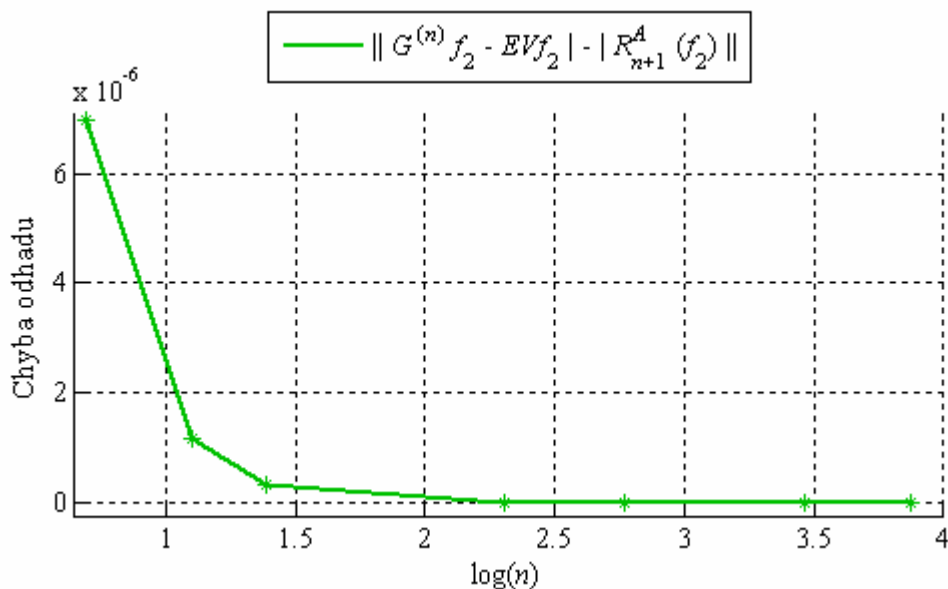
s přesností na patnáct desetinných míst. V tabulkách 6.5, 6.6, 6.7 a 6.8 jsou uvedeny výsledky odhadu chyby $R_{n+1}^A(f)$ pomocí Anti-Gaussovy kvadratury, v posledním sloupci tabulek je uveden rozdíl skutečné chyby a odhadu chyby. Pro názornost je tento rozdíl znázorněn na obrázcích 6.5, 6.6, 6.7 a 6.8 v závislosti na zvyšujícím se řádu kvadratury n . Při výpočtu je použita, stejně jako v předchozí kapitole, Gauss-Legendrova kvadratura.

6 NUMERICKÉ EXPERIMENTY

Tabulka 6.5 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury i.

$\int_0^1 f_2(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx = 0,4000000000000000 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_2}$				
n	$G^{(n)}f_2$	$ G^{(n)}f_2 - EVf_2 $	$ R_{n+1}^A(f_2) $	$\ G^{(n)}f_2 - EVf_2 - R_{n+1}^A(f_2) \ $
2	0,398773984698085	0,001226015301915	0,001232969884315	0,000006954582400
3	0,399812411943790	0,000187588056210	0,000188751044763	0,000001162988553
4	0,399950385011779	0,000049614988221	0,000049929869224	0,000000314881003
10	0,399999342402803	0,000000657597197	0,000000661842927	0,000000004245730
16	0,399999932143452	0,000000067856548	0,000000068295174	0,000000000438626
32	0,399999997724191	0,000000002275809	0,000000002290527	0,000000000014718
48	0,399999999692833	0,000000000307167	0,000000000309154	0,000000000001987

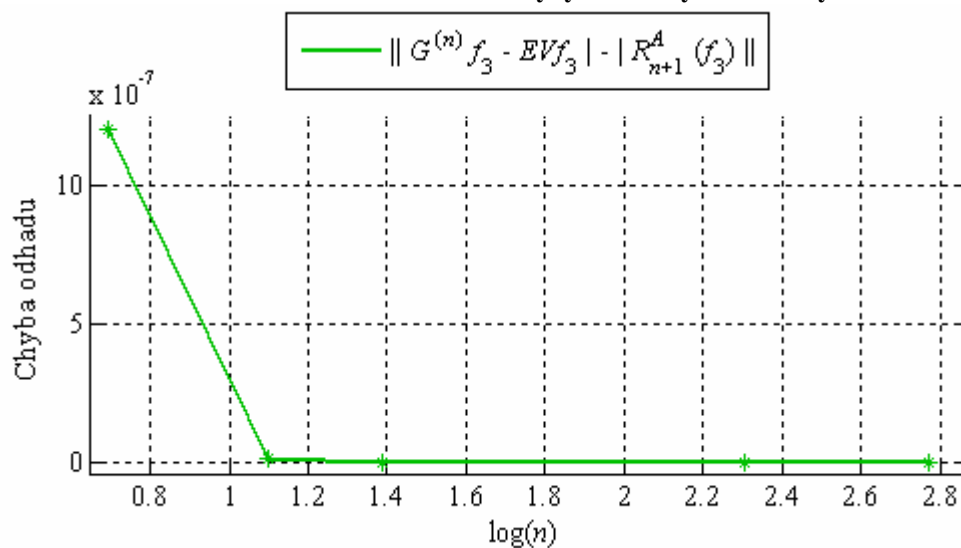
Obrázek 6.5 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury i.



Tabulka 6.6 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury ii.

$\int_0^1 f_3(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx = 0,693147180559945 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_3}$				
n	$G^{(n)}f_3$	$ G^{(n)}f_3 - EVf_3 $	$ R_{n+1}^A(f_3) $	$\ G^{(n)}f_3 - EVf_3 - R_{n+1}^A(f_3) \ $
2	0,692307692307692	0,000839488252253	0,000840689365280	0,000001201113027
3	0,693121693121693	0,000025487438252	0,000025498820680	0,000000011382428
4	0,693146417445483	0,000000763114462	0,000000763264681	0,000000000150219
10	0,693147180559945	0,000000000000000	0,000000000000000	0,000000000000000
16	0,693147180559946	0,0000000000000001	0,0000000000000001	0,000000000000000

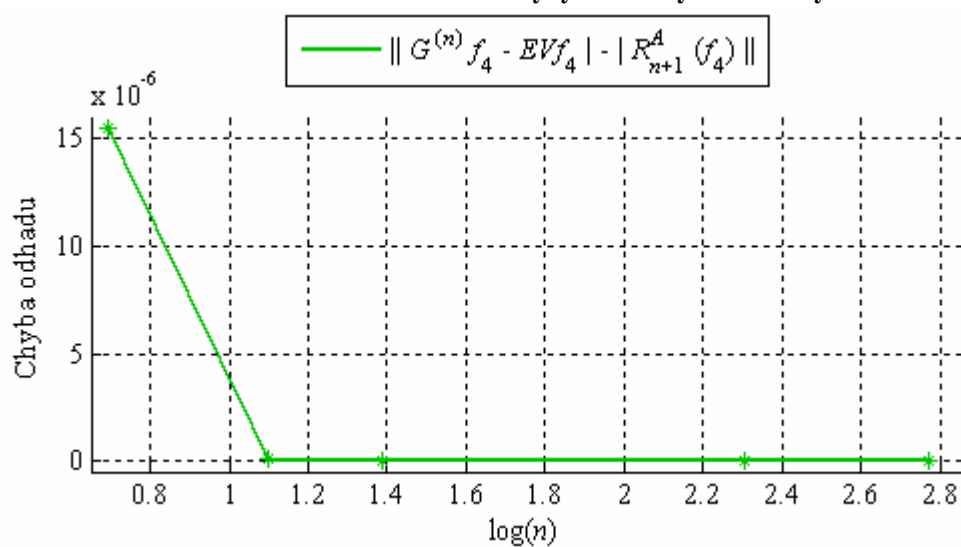
Obrázek 6.6 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury ii.



Tabulka 6.7 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury iii.

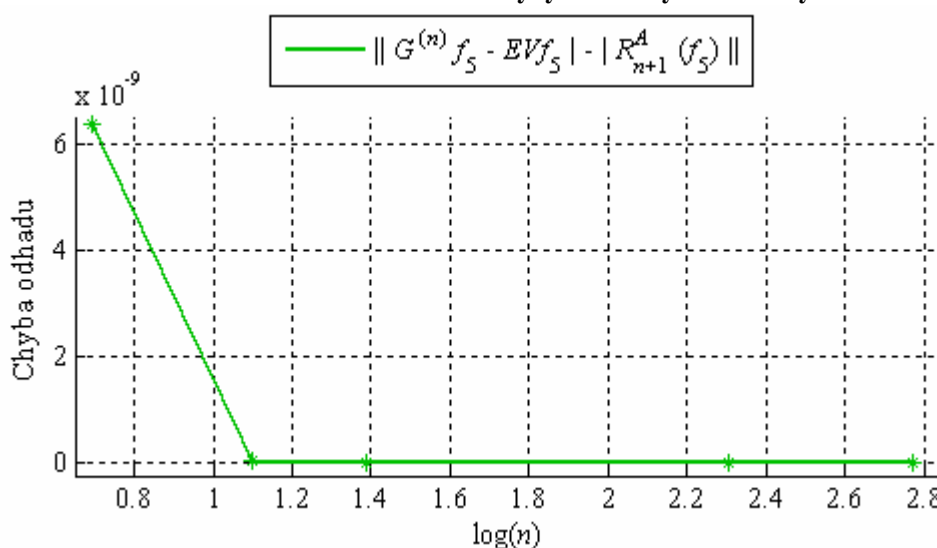
$\int_0^1 f_4(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x^4} dx = 0,866972987339911 = EVf_4$				
n	$G^{(n)} f_4$	$ G^{(n)} f_4 - EVf_4 $	$ R_{n+1}^A(f_4) $	$\ G^{(n)} f_4 - EVf_4\ - \ R_{n+1}^A(f_4)\ $
2	0,859522487506940	0,007450499832971	0,007435004397415	0,000015495435556
3	0,867518465938316	0,000545478598405	0,000545392067763	0,000000086530642
4	0,866955657454369	0,000017329885542	0,000017329938823	0,000000000053281
10	0,866972987373100	0,000000000033189	0,000000000033189	0,000000000000000
16	0,866972987339912	0,000000000000001	0,000000000000001	0,000000000000000

Obrázek 6.7 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury iii.



Tabulka 6.8 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury pomocí iv.

$\int_0^1 f_5(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+e^x} dx = 0,379885493041722 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_5}$				
n	$G^{(n)}f_5$	$ G^{(n)}f_5 - EVf_5 $	$ R_{n+1}^A(f_5) $	$\ G^{(n)}f_5 - EVf_5\ - R_{n+1}^A(f_5) $
2	0,379908868144309	0,000023375102587	0,000023368726275	0,000000006376312
3	0,379885308222793	0,000000184818929	0,000000184803546	0,000000000015383
4	0,379885494314648	0,000000001272926	0,000000001272882	0,000000000000044
10	0,379885493041722	0,000000000000000	0,000000000000000	0,000000000000000
16	0,379885493041723	0,000000000000001	0,000000000000000	0,000000000000001

Obrázek 6.8 - Přesnost odhadu chyby Gaussovy kvadratury iv.


Na uvedených obrázcích je vidět zpřesňování odhadu chyby s rostoucím n . Pro řád kvadratury $n > 16$ je chyba odhadu řádově menší než 10^{-10} .

6.3 Složená Gaussova kvadratura

Protože má Anti-Gaussova kvadratura $A^{(n+1)}f$ chybu výpočtu o stejné velikosti, ale opačného znaménka než Gaussova kvadratura $G^{(n)}f$, nabízí se myšlenka, jestli bude výpočet provedený podle vztahu

$$AG^{(2n+1)}f \overset{\text{ozn.}}{=} \frac{A^{(n+1)}f + G^{(n)}f}{2} \quad (6.1)$$

přesnější, než Gaussova kvadratura $G^{(n+1)}f$, kde je nutné znát rekurentní koeficienty α_k a β_k až do řádu $n + 1$ stejně jako u $AG^{(2n+1)}f$, nebo dokonce přesnější než $G^{(2n+1)}f$, kde je potřeba stejný počet vyčíslení integrované funkce f . $AG^{(2n+1)}f$ nazveme složenou Gaussovou kvadraturou.

6 NUMERICKÉ EXPERIMENTY

Tyto myšlenky byly testovány na následujících funkcích

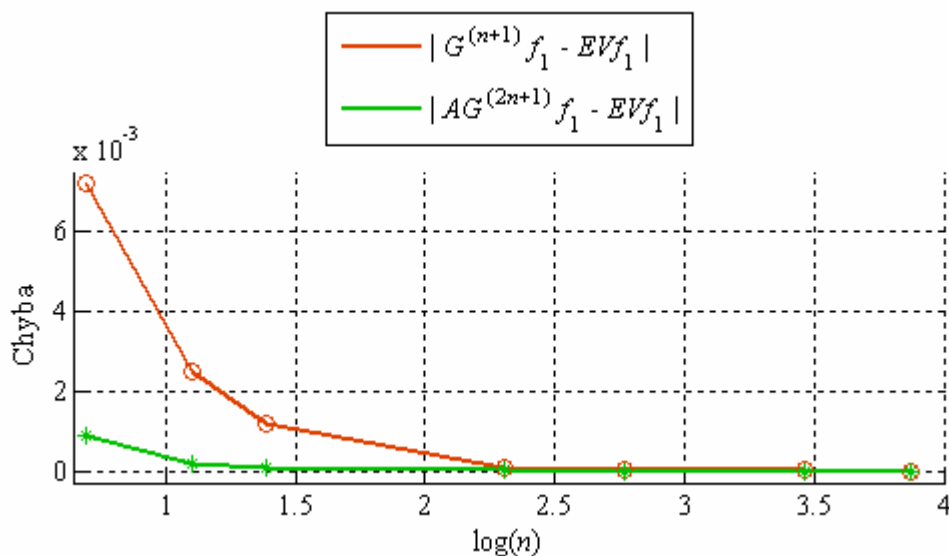
$$\begin{aligned} \text{i. } \int_0^1 f_1(x) dx &= \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} dx, & \text{ii. } \int_0^1 f_2(x) dx &= \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx, \\ \text{iii. } \int_0^1 f_3(x) dx &= \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx, & \text{iv. } \int_0^1 f_4(x) dx &= \int_0^1 \frac{1}{1+x^4} dx, \end{aligned}$$

pomocí Gauss-Legendrovy kvadratury a na 15 desetinných míst. Výsledky jsou uvedeny v tabulkách 6.9 až 6.16 a pro větší přehlednost znázorněny na obrázcích 6.9 až 6.16.

Tabulka 6.9 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury i.

$\int_0^1 f_1(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} dx = 0,666666666666667 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_1}$				
n	$G^{(n+1)} f_1$	$ G^{(n+1)} f_1 - EVf_1 $	$AG^{(2n+1)} f_1$	$ AG^{(2n+1)} f_1 - EVf_1 $
1	0,673887338679049	0,007220672012382	0,667534905693051	0,000868239026384
2	0,669179633899472	0,002512967232805	0,666860721247155	0,000194054580488
4	0,667827645374843	0,001160978708176	0,666738463670618	0,000071797003951
8	0,666756042936509	0,000089376269842	0,666670317058202	0,000003650391535
16	0,666689631499487	0,000022964832820	0,666667508640679	0,000000841974012
32	0,666669667367857	0,000003000701190	0,666666767064530	0,000000100397863
48	0,666667569328057	0,000000902661390	0,666666695951348	0,000000029284681

Obrázek 6.9 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury i.

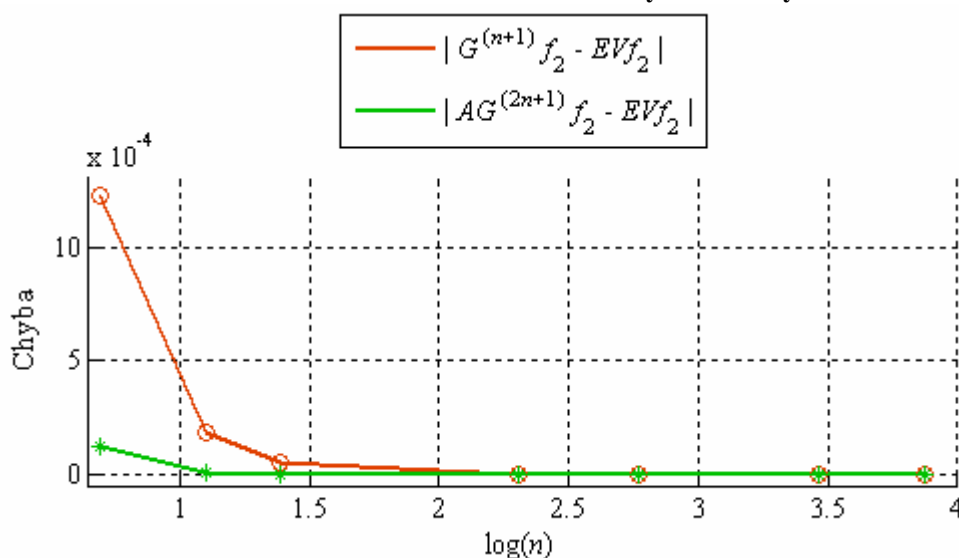


6 NUMERICKÉ EXPERIMENTY

Tabulka 6.10 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury ii.

$\int_0^1 f_2(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx = 0,4000000000000000 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_2}$				
n	$G^{(n+1)} f_2$	$ G^{(n+1)} f_2 - EVf_2 $	$AG^{(2n+1)} f_2$	$ AG^{(2n+1)} f_2 - EVf_2 $
1	0,398773984698085	0,001226015301915	0,400119554264703	0,000119554264703
2	0,399812411943790	0,000187588056210	0,400006954582400	0,000006954582400
4	0,399950385011779	0,000049614988221	0,400001162988553	0,000001162988553
8	0,399999342402803	0,000000657597197	0,400000007028977	0,000000007028977
16	0,399999932143452	0,000000067856548	0,400000000600145	0,000000000600145
32	0,399999997724191	0,000000002275809	0,400000000017209	0,000000000017209
48	0,399999999692833	0,000000000307167	0,400000000002205	0,000000000002205

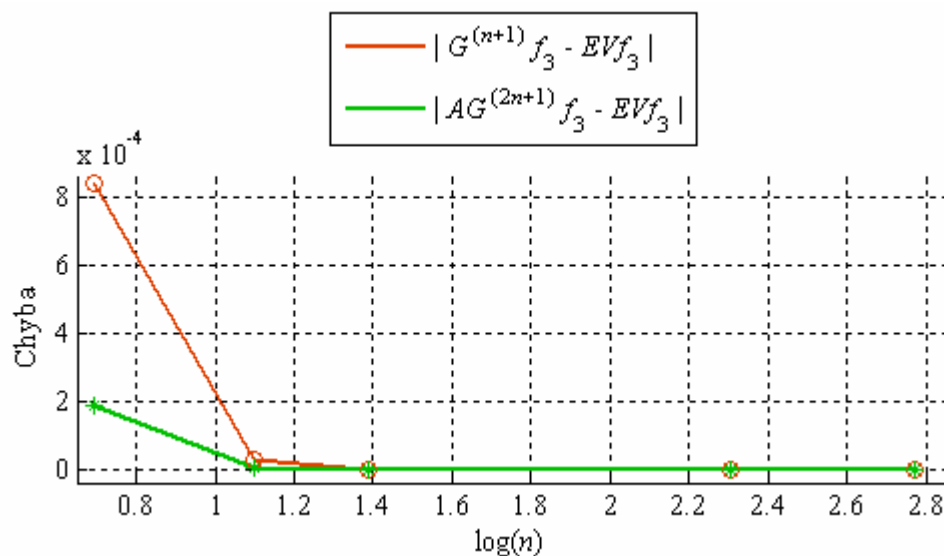
Obrázek 6.10 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury ii.



Tabulka 6.11 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iii.

$\int_0^1 f_3(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx = 0,693147180559945 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_3}$				
n	$G^{(n+1)} f_3$	$ G^{(n+1)} f_3 - EVf_3 $	$AG^{(2n+1)} f_3$	$ AG^{(2n+1)} f_3 - EVf_3 $
1	0,692307692307692	0,000839488252253	0,693333333333333	0,000186152773388
2	0,693121693121693	0,000025487438252	0,693148381672972	0,000001201113027
4	0,693146417445483	0,000000763114462	0,693147191942373	0,000000011382428
8	0,693147180559945	0,000000000000000	0,693147180559945	0,000000000000000
16	0,693147180559946	0,000000000000001	0,693147180559946	0,000000000000001

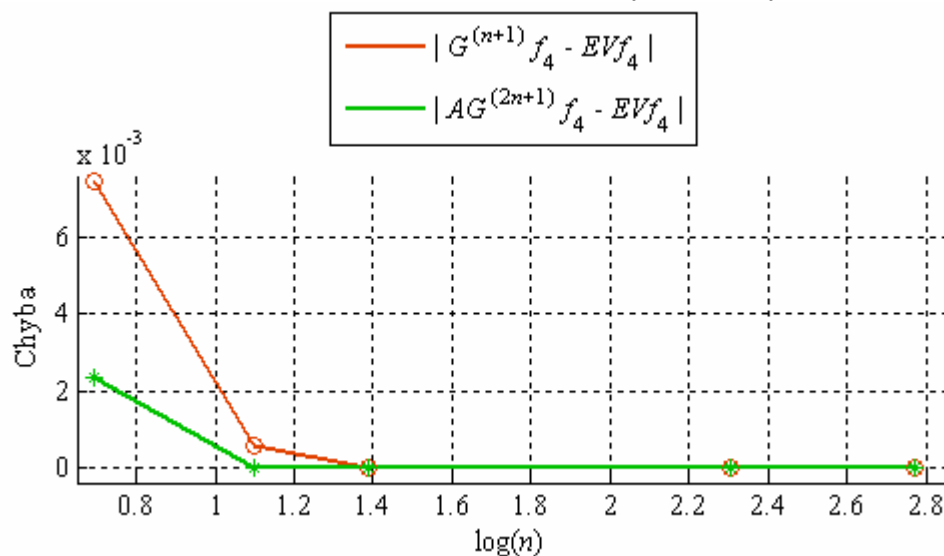
Obrázek 6.11 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iii.



Tabulka 6.12 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iv.

$\int_0^1 f_4(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x^4} dx = 0,866972987339911 = EVf_4$				
n	$G^{(n+1)}f_4$	$ G^{(n+1)}f_4 - EVf_4 $	$AG^{(2n+1)}f_4$	$ AG^{(2n+1)}f_4 - EVf_4 $
1	0,859522487506940	0,007450499832971	0,869337123354033	0,002364136014122
2	0,867518465938316	0,000545478598405	0,866957491904356	0,000015495435555
4	0,866955657454369	0,000017329885542	0,866973073870553	0,000000086530642
8	0,866972987373100	0,000000000033189	0,866972987339893	0,000000000000018
16	0,866972987339912	0,000000000000001	0,866972987339911	0,000000000000000

Obrázek 6.12 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury iv.



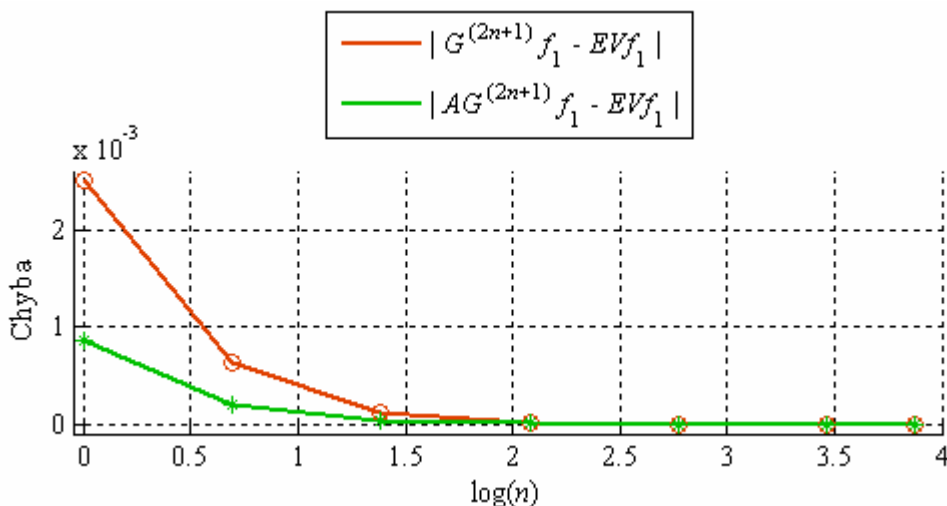
6 NUMERICKÉ EXPERIMENTY

Z uvedených výsledků v tabulkách 6.9 až 6.12 a obrázcích 6.9 až 6.12 je zřejmá až dvojnásobně vyšší přesnost složené Gauss-Legendrovy kvadratury pro $\log(n) < 1,4$. To by mohlo být využitelné zejména v případech, kdy je složitější určit rekurentní koeficienty vyšších řádů.

Tabulka 6.13 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury v.

$\int_0^1 f_1(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{1}{2}} dx = 0,6666666666666667 = EVf_1$				
n	$G^{(2n+1)} f_1$	$ G^{(2n+1)} f_1 - EVf_1 $	$AG^{(2n+1)} f_1$	$ AG^{(2n+1)} f_1 - EVf_1 $
1	0,669179633899472	0,002512967232805	0,667534905693051	0,000868239026384
2	0,667296789694568	0,000630123027901	0,666860721247155	0,000194054580488
4	0,666787474567124	0,000120807900457	0,666700691401362	0,000034024734695
8	0,666685911086835	0,000019244420168	0,666671759330800	0,000005092664133
16	0,666669406507334	0,000002739840667	0,666667364734998	0,000000698068331
32	0,666667033088212	0,000000366421545	0,666666758080747	0,000000091414080
48	0,666666777753086	0,000000111086419	0,666666694177149	0,000000027510482

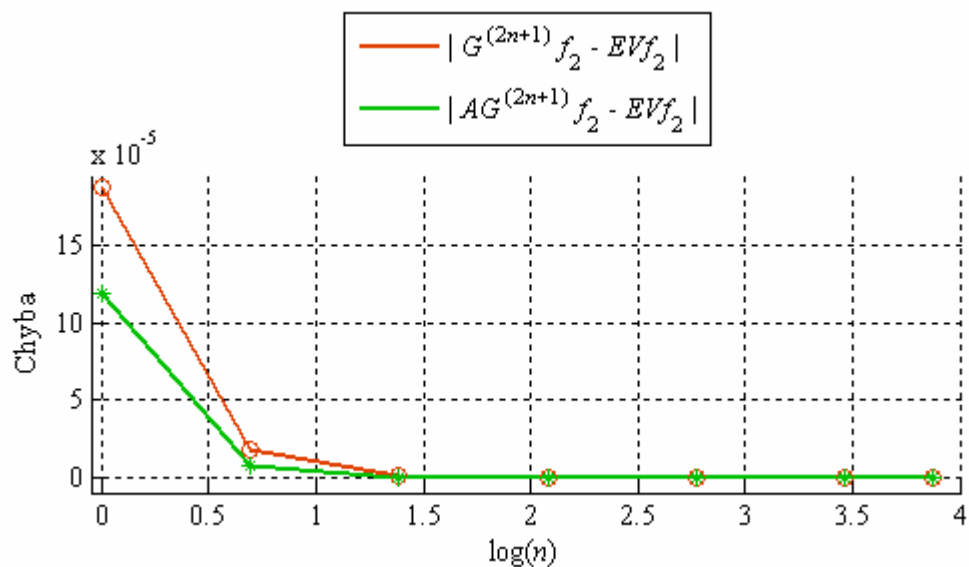
Obrázek 6.13 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury v.



Tabulka 6.14 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vi.

$\int_0^1 f_2(x) dx = \int_0^1 x^{\frac{3}{2}} dx = 0,4000000000000000 = EVf_2$				
n	$G^{(2n+1)} f_2$	$ G^{(2n+1)} f_2 - EVf_2 $	$AG^{(2n+1)} f_2$	$ AG^{(2n+1)} f_2 - EVf_2 $
1	0,399812411943790	0,000187588056210	0,400119554264703	0,000119554264703
2	0,399982448941936	0,000017551058064	0,400006954582400	0,000006954582400
4	0,399998910766898	0,000001089233102	0,400000314881003	0,000000314881003
8	0,399999949481216	0,000000050518784	0,400000012319968	0,000000012319968
16	0,399999998044406	0,000000001955594	0,400000000438626	0,000000000438626
32	0,399999999931655	0,000000000068345	0,400000000014718	0,000000000014718
48	0,399999999990651	0,000000000009349	0,400000000001987	0,000000000001987

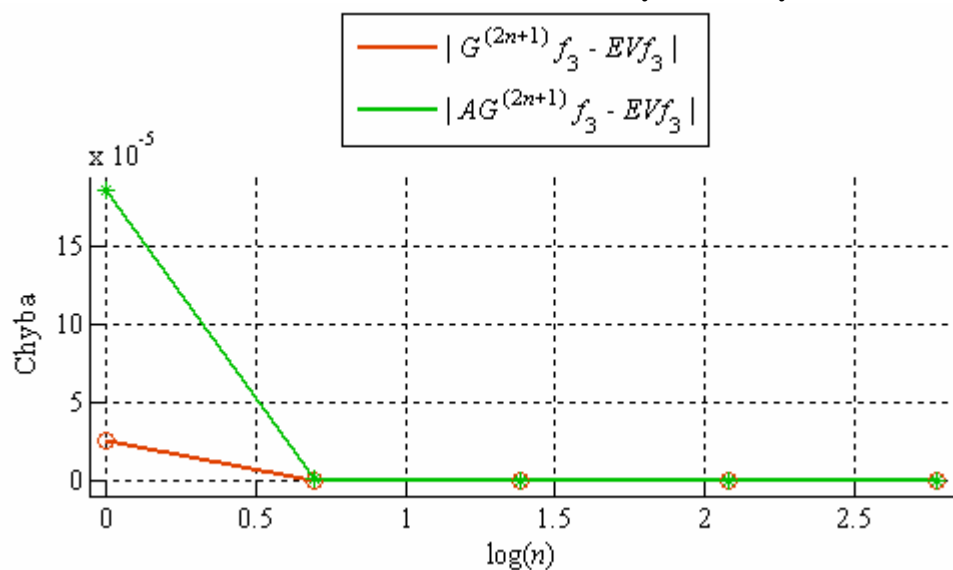
Obrázek 6.14 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vii.



Tabulka 6.15 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vii.

$\int_0^1 f_3(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x} dx = 0,693147180559945 = EVf_3$				
n	$G^{(2n+1)}f_3$	$ G^{(2n+1)}f_3 - EVf_3 $	$AG^{(2n+1)}f_3$	$ AG^{(2n+1)}f_3 - EVf_3 $
1	0,693121693121693	0,000025487438252	0,6933333333333333	0,000186152773388
2	0,693147157853040	0,000000022706905	0,693148381672972	0,000001201113027
4	0,693147180559928	0,0000000000000017	0,693147180710164	0,000000000150219
8	0,693147180559945	0,0000000000000000	0,693147180559945	0,0000000000000000
16	0,693147180559945	0,0000000000000000	0,693147180559946	0,0000000000000001

Obrázek 6.15 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury vii.

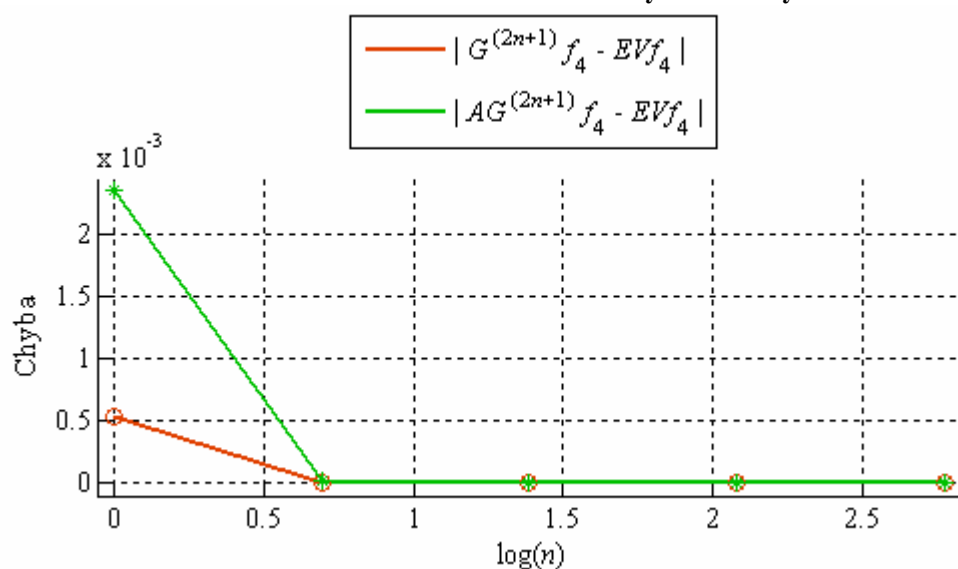


6 NUMERICKÉ EXPERIMENTY

Tabulka 6.16 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury viii.

$\int_0^1 f_4(x) dx = \int_0^1 \frac{1}{1+x^4} dx = 0,866972987339911 = \overset{\text{ozn.}}{EVf_4}$				
n	$G^{(2n+1)}f_4$	$ G^{(2n+1)}f_4 - EVf_4 $	$AG^{(2n+1)}f_4$	$ AG^{(2n+1)}f_4 - EVf_4 $
1	0,867518465938316	0,000545478598405	0,869337123354033	0,002364136014122
2	0,866971017474298	0,000001969865613	0,866957491904356	0,000015495435555
4	0,866972986762238	0,000000000577673	0,866972987393191	0,000000000053280
8	0,866972987339911	0,000000000000000	0,866972987340278	0,000000000000367
16	0,866972987339911	0,000000000000000	0,866972987339912	0,000000000000001

Obrázek 6.16 - Přesnost složené Gaussovy kvadratury viii.



Z výsledků uvedených v tabulkách 6.13 až 6.16 se nedá objektivně určit, jestli je složená Gaussova kvadratura $AG^{(2n+1)}f$ přesnější než Gaussova kvadratura $G^{(2n+1)}f$. Pro funkce f_1 a f_2 je složená Gaussova kvadratura přesnější pro $\log(n) < 1,4$, zatímco pro funkce f_3 a f_4 je tomu naopak.

7 Závěr

Metoda hraničních zdrojů umožňuje řešit úlohy neutronových transportních rovnic s vysokou přesností, je však výpočetně velmi náročná, protože je nutné vyhodnotit velký počet Legendrových úhlových momentů přidružené Greenovy funkce, které jsou integrálem ze součinu Chandrasekharových polynomů a složité váhové funkce, která zahrnuje různé singularity.

V této práci byl daný integrand prozkoumán a byly analyzovány singularity, vyskytující se v koncových bodech integračního intervalu. Dále byly prostudovány možnosti numerického výpočtu daného integrandu pomocí kvadraturních formulí Gaussova typu a odhadnuta chyba numerického výpočtu pomocí Anti-Gaussových kvadraturních formulí. Byly implementovány vybrané kvadraturní formule a výsledky modelových úloh byly porovnány v závislosti na dosažené přesnosti a počtu vyhodnocení integrované funkce. V poslední části byla testována přesnost odhadu chyby numerického výpočtu.

Dalším krokem tohoto projektu bude rozšíření stávajícího kódu do 2D a poté do 3D sférické geometrie s anisotropním rozptylem. Cílem celého projektu je vytvořit časově závislý transportní kód pro modelování chování MYRRHY, který dokáže zacházet s podkritickým a externím zdrojem.

Použité zdroje

- [1] ALONSO, G. A. *Testing the feasibility of a 2D extension of the boundary source method*. Brussels (Belgium): Université Libre de Bruxelles. Faculté des Sciences Appliquées. 2008. 95 s., 7 s. příloh. Vedoucí práce Prof. Dr. Ir. R. Robert Beauwens.
- [2] CASE, K. Scattering theory, orthogonal polynomials, and the transport equation. *Journal of Mathematical Physics*. 1974, vol. 15, s. 974-983.
April 1996, vol. 65, no. 214, s. 739-747.
- [3] DAVIS, P. J. – RABONOWITZ, P. *Methods of numerical integration*. 2nd edition, San Diego, California: Academic Press, Inc., 1983. ISBN 0-12-206360-0.
- [4] GAUTSCHI, W. *Orthogonal Polynomials, Quadrature, and Approximation: Computational Methods and Software (in Matlab)*. Heidelberg: Springer, 2006. ISBN 978-3-540-31062-4.
- [5] KRAUSE R. – DREXLER C. *LinAl home page* [online]. c2000, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-09]. Dostupné z: <<http://linal.sourceforge.net/LinAl/Doc/linal.html>>.
- [6] LAPACK -- Linear Algebra PACKage [online]. c1992, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-09]. Dostupné z: <<http://www.netlib.org/lapack/>>.
- [7] LAURIE, D. P. Anti-Gaussian Quadrature Formulas. *Mathematics of Computation*, April 1996, vol. 65, no. 214, s. 739-747.
- [8] MATLAB [program na CD-ROM]. Ver. 7.1.0.246 (R14) Service Pack 3. Natick (Massachusetts, USA), 2.9.2005.
- [9] MYRRHA home - SCK•CEN [online]. c1999, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-05-02]. Dostupné z: <<http://myrrha.sckcen.be/>>.
- [10] VAN DEN EYNDE, G. *Neutron Transport with Anisotropic Scattering, Theory and Applications*. Brussels (Belgium): Université Libre de Bruxelles. Faculté des Sciences Appliquées. 2005. 166 s., 16s. příloh. Vedoucí práce Prof. Dr. Ir. R. Robert Beauwens.
- [11] VAN DEN EYNDE, G. – BEAUWENS, R. – MUND, E. Development of a Gauss-Chandrasekhar Quadrature for the Boundary Sources Method. *Transport Theory and Statistical Physics*, March 2008, vol. 37, s. 344-360.
- [12] VAN DEN EYNDE, G. – BEAUWENS, R. – MUND, E. The Boundary Source Method with Arbitrary Order Anisotropic Scattering. *Nuclear Science and Engineering*, 2007, vol. 155, s. 300-309.

POUŽITÉ ZDROJE

- [13] WEISSTEIN, E. W. *Brent's Method* [online]. c1999, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-10]. Dostupné z : <<http://mathworld.wolfram.com/BrentsMethod.html>>.
- [14] WEISSTEIN, E. W. *Fundamental Theorem of Gaussian Quadrature* [online]. c1999, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-22]. Dostupné z: <<http://mathworld.wolfram.com/FundamentalTheoremofGaussianQuadrature.html>>.
- [15] WEISSTEIN, E. W. *Chebyshev Approximation Formula* [online]. c1999, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-10]. Dostupné z: <<http://mathworld.wolfram.com/ChebyshevApproximationFormula.html>>.
- [16] WEISSTEIN, E. W. *Lambert W-Function* [online]. c1999, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-10]. Dostupné z: <<http://mathworld.wolfram.com/LambertW-Function.html>>.
- [17] WEISSTEIN, E. W. *Meixner Polynomial of the First Kind* [online]. c1999, poslední revize 3.5.2010 [cit. 2010-04-20]. Dostupné z: <<http://mathworld.wolfram.com/MeixnerPolynomialoftheFirstKind.html>>.

Seznam příloh

Příloha [1] - MYRRHA, Multi-purpose hYbrid Research Reactor for High-tech Applications.....	1
Příloha [2] - Prostorový tok problému Cardona s isotropním rozptylem a relativní difference s výsledky uvedenými v [1].....	2
Příloha [3] - Prostorový tok problému Cardona s aniisotropním rozptylem a relativní difference s výsledky uvedenými v [1].....	3
Příloha [4] - Prostorový tok problému Reed s isotropním rozptylem a relativní difference s výsledky uvedenými v [1].....	4